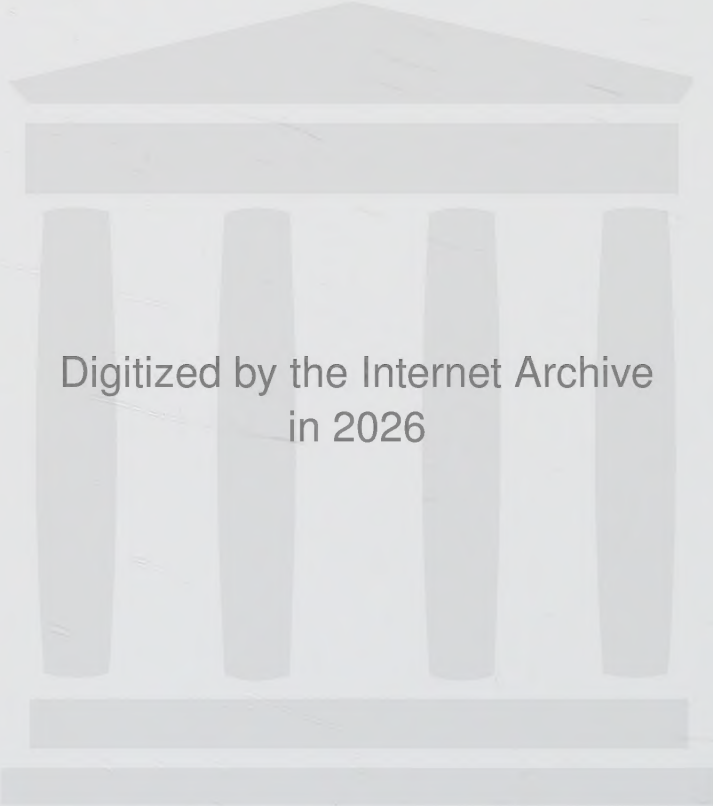


**Fehlerabschätzungen bei der numerischen Integration
in einer und mehreren Dimensionen**

Georgios Akrivis

1903



Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41554009_0085

Fehlerabschätzungen bei der numerischen Integration
in einer und mehreren Dimensionen

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
eines Doktors der Naturwissenschaften
der Fakultät für Mathematik
der Ludwig-Maximilians-Universität
München

vorgelegt von
Georgios Akrivis
aus Chrysovitsa bei Ioannina (Griechenland)

eingereicht am 8.12.1982

1. Berichterstatter : Prof. Dr. G. Hämmerlin
2. Berichterstatter : Prof. Dr. H.-O. Walther

Tag der mündlichen Prüfung : 21.2.1983



Meiner Mutter zum Andenken

INHALT

EINLEITUNG	1
I. ABLEITUNGSFREIE ABSCHÄTZUNGEN VON QUADRATURFEHLERN	8
1.1 Eine Seminorm und die dadurch induzierte Norm des Fehlerfunktional R_n	10
1.2 Einfache Darstellungen von $\ R_n\ $	14
1.3 Eine optimale Abschätzung	17
1.4 Abschätzungen von $\ R_n\ $ mit approximationstheore- tischen Mitteln	20
1.5 Abschätzung von $\ R_n\ $ durch Entwicklung nach Tschebyscheff-Polynomen	33
1.6 Asymptotisches Verhalten von $\ R_n\ $ für $r \rightarrow 1+$ bei Gauß-Gegenbauer-Quadraturformeln	49
1.7 Offenes und geschlossenes Clenshaw-Curtis-Verfahren und nichtsymmetrische Quadraturformeln	57
1.8 Vergleich der Abschätzungen - Numerische Beispiele	74
II. ABSCHÄTZUNG VON KUBATURFEHLERN	82
2.1 Einführung einer Seminorm	84
2.2 Einfache Darstellungen für $\ R\ $	86

2.3 Abschätzung von $\ R_n\ $ bei der Integration über ein Rechteck	87
2.4 Abschätzung von $\ R_n\ $ bei der Integration über ein Dreieck	93
2.5 Kubatur durch Interpolation	101
LITERATUR	112

BEZEICHNUNGEN

$a_{n,i}$	siehe (2.5.6), S. 104
A_n	siehe (2.5.7), S. 104
B_n	siehe (2.5.8), S. 104
c_n	$c_n := 2^{4n-3} n! [(n-1)!]^4 / [(2n-1)!]^2$
C_n	siehe (1.5.20), S. 38
C_n^α	siehe (1.5.33), S. 40
$C_{1,n}$	siehe (2.4.5), S. 97
$C_{2,n}$	siehe (2.4.7), S. 97
D	$D := \{(u,v) : u,v \geq 0, u+v \leq 1\}$
d_n	$d_n := n 2^{4n-4} [(n-1)!]^4 / \{(n-1)(2n-1)[(2n-2)!]^2\}$
d_n^α	siehe (1.5.37), S. 41
D_n^α	siehe (1.5.36), S. 41
D_n°	$D_n^\circ := 2^{4n} (n!)^4 / \{(2n+1)[(2n)!]^2\}$
δ_n	$\delta_n := 2^{2n+1} (n!)^4 (n+1) / [(2n+1)!]^2$
E_d	siehe S. 21
H_2^r	siehe S. 12
ξ_n	siehe S. 76
ξ'_n	siehe S. 76
$\mathbb{P}_d$	Raum der Polynome vom Höchstgrad d
p_d	beste Approximierende an φ_1 aus $\mathbb{P}_d$
p_d^{**}	" " " φ_2 " "
p_{kl}	$p_{kl}(x) := x^k (1+x)^l$

$P_k^{(\alpha, \beta)}$	Jacobi-Polynome, siehe (1.5.27), S. 39
π_k	Polynom höchstens k-ten Grades
q_k	$q_k(x) := x^k$
q_{kl}	$q_{kl}(x, y) := x^k y^l$
$Q_n^{(\alpha, \alpha)}$	Jacobi-Funktionen zweiter Art, siehe (1.6.4), S. 50
σ_n^H	siehe (1.3.2), S. 17
σ_n^A	siehe (1.4.32), S. 29
σ_n^T	siehe (1.5.40), S. 41
σ_n^U	siehe (1.5.41), S. 42
σ_n^*	siehe (1.5.42), S. 42
σ_n^L	siehe (1.6.15), S. 53
$\sigma_n^\square$	siehe (2.3.6), S. 90
σ_n^Δ	siehe (2.4.9), S. 98
Σ'	$\Sigma' x_i := \sum_{i=k}^1 x_k + \sum_{i=k+1}^1 x_i, \quad 1 \geq k$
T_j	Tschebyscheff-Polynome erster Art
$t_i^{(j)}$	$T_j(x) = \sum_{i=0}^j t_i^{(j)} x^i$
T_{kl}	$T_{kl}(x, y) := T_k(x) T_l(y)$
τ	$\tau := r - \sqrt{r^2 - 1}$
τ_i	$\tau_i := r_i - \sqrt{r_i^2 - 1}, \quad i=1, 2$
$\tilde{\tau}_2$	$\tilde{\tau}_2 := \tau_2/2$
φ_1	$\varphi_1(x) := 1/(r-x)$
φ_2	$\varphi_2(x) := 1/(r^2 - x^2)$
φ_3	$\varphi_3(x) := x/(r^2 - x^2)$
$\tilde{\varphi}$	$\tilde{\varphi}(x) := 1/(r+x)$
X_ρ	$X_\rho := \{f : f \text{ holomorph für } z < \rho\}, \quad \rho > 1$
χ_1	$\chi_1(x, y) := 1/[(r_1 - x)(r_2 - y)]$

$$\chi_2 \quad \chi_2(x,y) := 1/[(r_1^2 - x^2) (r_2^2 - y^2)]$$

$$\psi_{r_i} \quad \psi_{r_i}(t) := 1/(r_i^2 - t^2) \quad , \quad i=1,2$$

$$\Omega \quad \Omega := \{ (x,y) : x \in [-1,1] \quad , \quad -(1+x)/2 \leq y \leq (1+x)/2 \}$$

$$|\cdot|_r \quad \text{siehe (1.1.2), S. 10}$$

$$|\cdot|_{r_1 r_2} \quad \text{siehe (2.1.2), S. 84}$$

$$\|\cdot\|_{2,r} \quad \text{siehe S. 12}$$

$$\cong \quad \text{asymptotisch gleich (} f \cong g \text{ für } r \rightarrow a : \iff \lim_{r \rightarrow a} \frac{f(r)}{g(r)} = 1 \text{)}$$

$$\sim \quad \text{asymptotisch proportional (} f \sim g \text{ für } r \rightarrow a : \iff \lim_{r \rightarrow a} \frac{f(r)}{g(r)} = \theta \neq 0 \text{)}$$

EINLEITUNG

a. Übersicht und bekannte Resultate

Quadratur

Bei der numerischen Integration wird das Integral I ,

$$I(f) := \int_{-1}^1 w(x) f(x) dx ,$$

durch eine Quadraturformel approximiert. Unter einer Quadraturformel verstehen wir in dieser Arbeit eine Linearkombination von Punktfunktionalen,

$$Q_n(f) := \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) \quad \text{mit} \quad -1 \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq 1 .$$

Bei der Integration einer $(d+1)$ -mal stetig differenzierbaren Funktion f durch eine Quadraturformel Q_n , die Polynome vom Höchstgrad d exakt integriert, tritt in der herkömmlichen Abschätzung des Quadraturfehlers $R_n(f)$,

$$R_n(f) := I(f) - Q_n(f) ,$$

der Term

$$\max_{-1 \leq \xi \leq 1} | f^{(d+1)}(\xi) |$$

auf. Dies bringt zwei Schwierigkeiten mit sich: Zum einen läßt sich dieses Maximum im allgemeinen, wenn überhaupt, nur mit erheblichem Aufwand bestimmen bzw. so scharf abschätzen, daß sich brauchbare Schranken für den Quadratur-

fehler ergeben. Zum anderen hat man in der Praxis die Rechnung für mehrere Werte von d durchzuführen, da man eine bestimmte Genauigkeit erreichen möchte und, falls dies mit einer Formel nicht gelingt, eine andere Formel mit höherem Exaktheitsgrad heranzieht.

Diese Schwierigkeiten entfallen für analytische Funktionen, wenn man ableitungsfreie Abschätzungen verwendet, deren Existenz leicht aus der allgemeinen Cauchyschen Integralformel einzusehen ist. Solche Fehlerabschätzungen wurden zum ersten Mal 1953 von Davis [16] hergeleitet. Das Fundament der Methode von Davis bildet folgende Aussage: Ist $(H, || \cdot ||)$ ein Hilbertraum und L ein stetiges, lineares Funktional auf H , so gilt

$$||L||^2 = \sum_{i=0}^{\infty} |Lg_i|^2, \quad$$

wenn $\{g_i : i \in \mathbb{N}_0\}$ ein vollständiges Orthonormalsystem auf H ist. Diese Identität folgt leicht aus dem Rieszschen Darstellungssatz und der Parsevalschen Gleichung (siehe z.B. Davis [18; S. 219]).

Ist das lineare Funktional R_n stetig auf H , so gilt für $f \in H$

$$|R_n(f)| \leq ||R_n|| \cdot ||f||.$$

Davis legte die Hardysche Klasse zugrunde und leitete für die elementare Sehnentrapez-, Simpson- und Weddleregel Abschätzungen der Norm des entsprechenden Fehlerfunktionalen her (die numerischen Werte wurden in [25] berichtigt). Davis [17] und Davis-Rabinowitz [19] setzten diese Untersuchungen unter schwächeren Regularitätsbedingungen an den Integranden fort. Aufbauend darauf schätzte Hämmerlin ([25], [26], [27]) die Norm des Fehlerfunktionalen für zusammengesetzte Newton-Côtes-Quadraturformeln in Abhängigkeit von der

Schrittweite h ab und machte diese Methode damit anwendungsfähig. Durch diese Arbeiten wurde das Problem für zusammengesetzte Newton-Côtes-Formeln befriedigend gelöst; z.B. lassen sich die Abschätzungen in [26] nicht verbessern (vgl. etwa Braß [6; S. 185 ff]).

Anders sieht die Situation für interpolatorische Quadraturformeln mit hohem Exaktheitsgrad aus, etwa für Gauß-Formeln, die besonders gerne verwendet werden. Es gibt zahlreiche Ergebnisse in dieser Richtung: Tabellen bei Davis [17] (berichtigt in [37]), Abschätzungen für verschiedene Werte von n bei Rabinowitz [47] und asymptotische Schranken für die Norm des Fehlerfunktional bei Chawla-Jain ([12], [13]) und McNamee [40]. Für Gauß-Quadraturformeln zu speziellen Gewichtsfunktionen berechnet Kofron [33] die von der Hardyschen Klasse induzierte Norm des Fehlerfunktional in Abhängigkeit von einem Parameter $b < 1$ (integriert wird hierbei über $[-b, b]$). Dieses Ergebnis ist allerdings nicht direkt anwendbar. Um aus [33] explizite Schranken zu gewinnen, hat man transzendente Funktionen abzuschätzen.

Die bis jetzt befriedigendste Lösung geht auf Hämmerlin [28] zurück. In [28] werden Gauß-Legendre-Quadraturformeln betrachtet, also Gauß-Formeln zur Gewichtsfunktion $w(x) := 1$. Hämmerlin legt den Funktionenraum

$$X_\rho := \{ f : f \text{ holomorph für } |z| < \rho \} \quad , \quad \rho > 1 ,$$

zugrunde. Er definiert darauf die Seminorm

$$\forall f \in X_\rho \quad |f|_r := \sup_{R_n(q_k) \neq 0} (|\alpha_k| r^k) \quad , \quad r \in (1, \rho) ,$$

mit $q_k(x) := x^k$. $\alpha_k, k \in \mathbb{N}_0$, sind hierbei die Koeffizienten der Taylorentwicklung von f ,

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k z^k \quad , \quad |z| < \rho .$$

Die dadurch induzierte Norm von R_n schätzt Hämmerlin durch einen einfachen Ausdruck σ_n^H ab. $\|R_n\|$ und σ_n^H sind Funktionen von r . σ_n^H ist zwar für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$, gibt aber für $r \rightarrow 1+$ nicht das richtige asymptotische Verhalten von $\|R_n\|$ wieder.

Kubatur

Konstruktion von Kubaturformeln:

Für die numerische Integration in einer Dimension (Quadratur) gibt es eine weitgehend abgerundete Theorie. Das Problem der numerischen Integration in mehreren Dimensionen (Kubatur) erweist sich als weitaus schwieriger, und grundsätzliche Fragen auf diesem Gebiet sind noch unbeantwortet (vgl. die Übersichtsartikel von Haber [24] und Mysovskikh [44]).

In dieser Arbeit wird die numerische Integration über Rechtecke und Dreiecke untersucht. Für diese Integrationsgebiete und spezielle Gewichtsfunktionen wurden Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl bis zu einem bestimmten (kleinen!) Exaktheitsgrad angegeben (siehe Hammer-Stroud [30], Linden-Kroll-Schmid [36], Möller [42], Morrow-Patterson [43], Radon [48], Schmid ([52],[53])). Dabei heißt der Exaktheitsgrad einer Kubaturformel, wenn für ihr Fehlerfunktional R gilt:

$$\forall_{\substack{k,l \in \mathbb{N}_0 \\ k+l \leq d}} R(q_{kl}) = 0 \quad \text{und} \quad \exists_{\substack{k,l \in \mathbb{N}_0 \\ k+l = d+1}} R(q_{kl}) \neq 0 \quad \text{mit} \quad q_{kl}(x,y) := x^k y^l.$$

Auf dem Einheitsquadrat $[-1,1]^2$ sind für die Gewichtsfunktion $w(x,y) := \sqrt{(1-x^2)(1-y^2)}$ Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl für jeden Exaktheitsgrad bekannt, für die Gewichtsfunktion

$w(x,y) := 1/\sqrt{(1-x^2)(1-y^2)}$ und Exaktheitsgrad von der Form $4m-1$, $m \in \mathbb{N}$, ebenfalls (siehe hierzu Schmid [53; S. 142 ff]). Für alle anderen Gewichtsfunktionen w mit $w(x,y) = w_1(x)w_2(y)$ haben ab Exaktheitsgrad $d=10$ (in Abhängigkeit von w oft auch schon für kleineres d) die Gauß-Produktformeln unter allen bekannten Kubaturformeln die kleinste Knotenzahl.

Ist der Integrationsbereich ein Dreieck und die Gewichtsfunktion konstant, so hat das "konische" Produkt von Gauß-Formeln für $d > 5$ die kleinste Knotenzahl unter allen bisher bekannten Kubaturformeln. Neben diesen Formeln sind auch die affin invarianten Kubaturformeln von Lauffer [35] von Bedeutung (siehe auch Grundmann-Möller [23] und Lyness-Jespersen [39]).

Fehlerabschätzungen:

Eine Verallgemeinerung der Peano-Kern-Methode auf den mehrdimensionalen Fall geht auf Sard [51; Chap. 4] zurück. Praktisch lassen sich mit dieser Methode nur für die einfachsten Kubaturformeln (Kubaturformeln mit kleiner Knotenzahl) Fehlerabschätzungen herleiten.

Für Produktkubaturformeln kann man nach einer Idee von Nikol'skii einfach zu Fehlerabschätzungen gelangen (siehe Stroud-Secrest [56; S. 72 ff]).

Wie schon Davis [16] bemerkte, läßt sich auch seine Methode auf den mehrdimensionalen Fall übertragen. Formal läßt sich dies für jedes beschränkte Gebiet durchführen, siehe Barnhill ([1],[2]). Für Produktkubaturformeln werden von Barnhill-Nielson [4] mit der Methode von Davis und von Chawla [11] mit funktionentheoretischen Mitteln Fehlerabschätzungen hergeleitet.

Eine Übersicht über Möglichkeiten der Abschätzung von Kubaturfehlern findet sich in Stroud [55; Chap. 5].

b. Zusammenfassung der Ergebnisse dieser Arbeit

Quadratur

Zunächst werden verschiedene Quadraturformeln mit dem Ziel untersucht, verbesserte Fehlerabschätzungen zu gewinnen; dabei liegt der Schwerpunkt auf dem für die Anwendung wichtigsten Fall der Gauß-Formeln.

Wir knüpfen hier an die schon erwähnte Arbeit von Hämmerlin [28] an und nutzen dann die Vorzeichenkenntnis von $R_n(q_j)$, $q_j(x) = x^j$, $j \in \mathbb{N}_0$, aus, um zuerst einfache, bisher nicht bekannte Darstellungen für die durch $|\cdot|_r$ induzierte Norm des Fehlerfunktional herzuleiten, die für die weiteren Betrachtungen grundlegend sind.

Mit diesen Darstellungen und mit Hilfe approximations-theoretischer Mittel, durch Entwicklung nach Tschebyscheff-Polynomen und mit den Jacobi-Funktionen zweiter Art gewinnen wir scharfe Abschätzungen für $\|R_n\|$. Für die Gauß-Formeln zu zwei speziellen Gewichtsfunktionen kann sogar die Norm von R_n als einfacher, geschlossener Ausdruck explizit angegeben werden.

Darüber hinaus wird das asymptotische Verhalten von $\|R_n\|$ als Funktion von r für $r \rightarrow \infty$ und für $r \rightarrow 1+$ untersucht.

Ein erfreuliches Nebenergebnis unserer Betrachtungen ist die Klärung der in der Quadraturtheorie seit langem offenen Frage nach der Definitheit oder Nichtdefinitheit der Clenshaw-Curtis-Quadraturformeln. Wir zeigen nämlich, daß die Clenshaw-Curtis-Formeln für $n \leq 3$ definit und für $n > 3$ nichtdefinit sind.

Kubatur

Zunächst übertragen wir unsere Ergebnisse aus dem ein-dimensionalen Fall und geben scharfe Abschätzungen für Pro-

duktkubaturformeln bei der Integration über ein Rechteck und für das konische Produkt bei der Integration über ein Dreieck an.

Dann betrachten wir Kubaturverfahren für ein Dreieck als Integrationsbereich, die aus Interpolation mit Polynomen hervorgehen. Zur Herleitung dieser Verfahren ziehen wir ein bekanntes Resultat heran, das zu bestimmten Knotenkonfigurationen die eindeutige Lösbarkeit der zugehörigen Interpolationsaufgabe garantiert. Als Spezialfall sind darin die Kubaturformeln von Lauffer [35] enthalten.

Wir leiten darüber hinaus aus einer Fehlerabschätzung für das Interpolationsproblem durch Integration eine Abschätzung des Kubaturfehlers her. Diese ist für die Kubaturformeln von Lauffer eine wesentliche Verbesserung gegenüber der bis jetzt bekannten Abschätzung, die auf Phillips [46] zurückgeht.

Herrn Prof. Dr. G. Hämmerlin danke ich herzlich für die Anregung, für fruchtbare Diskussionen und für das stete Interesse am Fortgang dieser Arbeit.

Besonderer Dank gilt auch meinen Freunden Dr. E. Schäfer für die zahlreichen, anregenden Gespräche, A. Burgstaller, K. Hafner und Dr. L. Wagatha für kritische Bemerkungen zur Darstellung.

Außerdem danke ich der "Alexander S. Onassis" Stiftung, die mich während der ersten beiden Jahre meines Promotionsstudiums mit einem Stipendium unterstützte.

I. ABLEITUNGSFREIE ABSCHÄTZUNGEN VON QUADRATURFEHLERN

In diesem Kapitel leiten wir für eine Klasse von Quadraturformeln Abschätzungen für die durch eine Seminorm induzierte Norm des Fehlerfunktional

$$R_n(f) := \int_{-1}^1 w(x) f(x) dx - \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

her.

Diese Seminorm wurde erstmals von Hämmerlin [28] verwendet und wird im ersten Paragraphen eingeführt.

Im zweiten Paragraphen geben wir neue, einfache Darstellungen für $\|R_n\|$ an, die das Fundament unserer weiteren Betrachtungen bilden.

Im Abschnitt 1.3 leiten wir auf andere Weise eine Abschätzung von Hämmerlin [28] für die Norm des Fehlerfunktional von Gauß-Legendre-Quadraturformeln her. Diese Schranke ist für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$, aber für $r \rightarrow 1+$ verhält sie sich wie $1/(r-1)^{2n}$ und gibt das asymptotische Verhalten von $\|R_n\|$ nicht richtig wieder.

Mit Hilfe approximationstheoretischer Mittel werden im Paragraphen 1.4 Abschätzungen hergeleitet, die sich für $r \rightarrow 1+$ wie $1/(r-1)$ verhalten. Diese Abschätzungen gelten für eine ganze Klasse von Quadraturformeln und stellen für den Spezialfall der Gauß-Legendre-Formeln und kleines r eine wesentliche Verbesserung der Ergebnisse von Hämmerlin [28] dar. Andererseits sind sie für $r \rightarrow \infty$ zwar asymptotisch proportional, aber nicht asymptotisch gleich $\|R_n\|$.

Im Paragraphen 1.5 werden durch Entwicklung nach Tschebyscheff-Polynomen Abschätzungen für $\|R_n\|$ hergeleitet, die

für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch proportional zu $1/(r-1)$ und für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ sind. Für Gauß-Formeln zu den Gewichtsfunktionen $\sqrt{1-x^2}$ und $1/\sqrt{1-x^2}$ und für Formeln vom Lobatto-Typ zu $1/\sqrt{1-x^2}$ geben wir $\|R_n\|$ als einfachen, geschlossenen Ausdruck an.

Das asymptotische Verhalten von $\|R_n\|$ für Gauß-Gegenbauer-Formeln, also für Gauß-Formeln zu den Gewichtsfunktionen $(1-x^2)^\alpha$, $\alpha > -1$, untersuchen wir im Abschnitt 1.6. Für $\alpha \geq 0$ leiten wir auch Abschätzungen her, die für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ sind.

Im Paragraphen 1.7 zeigen wir, daß die Clenshaw-Curtis-Formeln für $n \geq 4$ nichtdefinit sind. Wir leiten auch Fehlerabschätzungen für verschiedene Quadraturformeln, unter anderem für Filippi- und Radau-Formeln, sowie für Gauß-Formeln zur Gewichtsfunktion $1+x$ her.

Letztere spielen eine entscheidende Rolle für das konische Produkt von Gauß-Formeln zur numerischen Integration über ein Dreieck, womit wir uns (unter anderem) im zweiten Kapitel beschäftigen.

Numerische Beispiele und Vergleiche der verschiedenen Abschätzungen schließen das erste Kapitel ab.

1.1 Eine Seminorm und die dadurch induzierte Norm des Fehlerfunktional R_n

Für $\rho > 1$ definieren wir den Funktionenraum

$$X_\rho := \{ f : f \text{ holomorph für } |z| < \rho \} .$$

Sei R_n das Fehlerfunktional

$$\forall_{f \in X_\rho} \quad R_n(f) := \int_{-1}^1 w(x) f(x) dx - \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

einer Quadraturformel mit Stützstellen $x_1, \dots, x_n$ in $[-1, 1]$. Für die Gewichtsfunktion gelte, wie üblich

$$\forall_{x \in [-1, 1]} \quad w(x) \geq 0, \quad w \in L_1[-1, 1] \text{ und } \|w\|_1 \neq 0 .$$

Jede Funktion f aus X_ρ läßt sich für $|z| < \rho$ als Potenzreihe darstellen :

$$(1.1.1) \quad f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k z^k .$$

Auf X_ρ wird durch

$$(1.1.2) \quad \forall_{f \in X_\rho} \quad |f|_r := \sup \{ |\alpha_k| r^k : k \in \mathbb{N}_0 \text{ mit } R_n(q_k) \neq 0 \}$$

mit $r \in (1, \rho)$ eine Seminorm definiert. Dabei sind α_k , $k \in \mathbb{N}_0$, die Koeffizienten bei der Taylorentwicklung von f um 0 und $q_k(x) = x^k$, $k \in \mathbb{N}_0$.

R_n ist auf $(C[-1, 1], \|\cdot\|_\infty)$ stetig, und da die Reihe (1.1.1) gleichmäßig in $[-1, 1]$ konvergiert, gilt

$$R_n(f) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k R_n(q_k) .$$

Hieraus folgt

$$(1.1.3) \quad |R_n(f)| \leq \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{|R_n(q_k)|}{r^k} \right) |f|_r.$$

Da für $k \in \mathbb{N}_0$, $|R_n(q_k)| \leq \Gamma_n$ mit

$$(1.1.4) \quad \Gamma_n := \|w\|_1 + \sum_{i=1}^n |w_i|$$

gilt, konvergiert die Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} \{|R_n(q_k)|/r^k\}$; für die durch $|\cdot|_r$ induzierte Norm des Fehlerfunctionals R_n gilt also $\|R_n\| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \{|R_n(q_k)|/r^k\}$. Durch Betrachtung der Partialsummen der Reihe $\sum_{k=0}^{\infty} \text{sgn}(R_n(q_k)) (z/r)^k$ erhält man schließlich

$$(1.1.5) \quad \boxed{\|R_n\| = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|R_n(q_k)|}{r^k}}$$

Hieraus läßt sich sofort das asymptotische Verhalten von $\|R_n\|$ für $r \rightarrow \infty$ ablesen. Ist nämlich d der Exaktheitsgrad der Quadraturformel, d.h. $R_n(q_k)=0$ für $k=0, \dots, d$ und $R_n(q_{d+1}) \neq 0$, so gilt

$$\begin{aligned} \|R_n\| &= \sum_{k=d+1}^{\infty} \frac{|R_n(q_k)|}{r^k} \leq \frac{|R_n(q_{d+1})|}{r^{d+1}} + \Gamma_n \sum_{k=d+2}^{\infty} \frac{1}{r^k} \\ &= \frac{|R_n(q_{d+1})|}{r^{d+1}} + \Gamma_n \cdot \frac{1}{r^{d+1}(r-1)}, \end{aligned}$$

woraus sich

$$(1.1.6) \quad \|R_n\| \approx \frac{|R_n(q_{d+1})|}{r^{d+1}} \quad \text{für } r \rightarrow \infty$$

ergibt. Dabei heißen zwei Funktionen f und g asymptotisch

gleich für $r \rightarrow a$ ($f \approx g$ für $r \rightarrow a$) bzw. $a+$, wenn

$$\lim_{r \rightarrow a} \frac{f(r)}{g(r)} = 1 \quad \text{bzw.} \quad \lim_{r \rightarrow a+} \frac{f(r)}{g(r)} = 1 \quad \text{mit} \quad a \in \mathbb{R} \cup \{-\infty, \infty\} \quad \text{bzw.}$$

$a \in \mathbb{R}$ gilt.

Wie aus (1.1.3), (1.1.5) folgt, gilt für $f \in X_\rho$ die Abschätzung

$$(1.1.7) \quad |R_n(f)| \leq \inf_{1 < r < \rho} (\|R_n\| |f|_r).$$

Unser Ziel ist es, $\|R_n\|$ für verschiedene Quadraturformeln abzuschätzen bzw. zu berechnen und das asymptotische Verhalten für $r \rightarrow 1+$ zu untersuchen. Zuerst geben wir aber zwei Möglichkeiten zur Abschätzung der Seminorm $|f|_r$ an, die ja nur dann ermittelt werden kann, wenn die Potenzreihe von f bekannt ist (siehe Hämmerlin [28]). Dazu definieren wir zuerst die Hardysche Klasse H_2^r ,

$H_2^r := \{f: f \text{ holomorph für } |z| < r \text{ und}$

$$\|f\|_{2,r} := \left(\int_{|z|=r} |f(z)|^2 |dz| \right)^{1/2} < \infty \}.$$

Wegen der Orthonormalität des vollständigen Systems

$\{g_k, k \in \mathbb{N}_0\}$ mit $g_k(z) := \frac{z^k}{r^k \sqrt{2\pi r}}$ folgt aus der Parsevalschen

Gleichung die Identität

$$(1.1.8) \quad \|f\|_{2,r} = \sqrt{2\pi r} \left(\sum_{k=0}^{\infty} |\alpha_k|^2 r^{2k} \right)^{1/2}.$$

Für $r < \rho$ ist $X_\rho \subset H_2^r$ und aus (1.1.8) ergibt sich

$$(1.1.9) \quad |f|_r \leq \frac{1}{\sqrt{2\pi r}} \|f\|_{2,r}$$

und, wenn wir $\|f\|_{2,r}$ weiter abschätzen,

$$(1.1.10) \quad |f|_r \leq \sup_{|z|=r} |f(z)|.$$

Wie man aus (1.1.8) sieht, ist $\|f\|_{2,r}$ als Funktion von r monoton wachsend, man kann also in (1.1.9) $\|f\|_{2,r}$ durch $\|f\|_{2,r'}$ mit $r' > r$ ersetzen, solange $f \in H_2^{r'}$ ist. Entsprechend kann die rechte Seite in (1.1.10) durch $\sup_{|z|=r'} |f(z)|$ ($r' > r$) ersetzt werden, was natürlich nur dann sinnvoll ist, wenn $\sup_{|z|=r'} |f(z)|$ endlich ist. Möglichkeiten zur Verbesserung der Abschätzungen (1.1.9) und (1.1.10) werden wir im Abschnitt 1.8 diskutieren.

Unser Interesse gilt einem Unterraum von X_ρ , bestehend aus denjenigen Funktionen, die für $z \in [-1, 1]$ reellwertig sind.

Wir bemerken noch, daß die Festlegung des Integrationsintervalls auf $[-1, 1]$ keine Einschränkung der Allgemeinheit bedeutet. Jedes beschränkte Intervall $[a, b]$ läßt sich ja affin auf $[-1, 1]$ transformieren, und die Ergebnisse sind affin invariant.

1.2 Einfache Darstellungen für $\|R_n\|$

Grundlage für die weiteren Untersuchungen in diesem Kapitel bilden einige einfache Darstellungen von $\|R_n\|$, die in diesem Abschnitt hergeleitet werden. Dazu wird die Vorzeichenkenntnis von $R_n(q_k)$, $k \in \mathbb{N}_0$, ausgenutzt.

Zuerst werden Quadraturformeln betrachtet, welche folgender Bedingung genügen:

$$(1.2.1) \quad \exists \quad \forall \quad \varepsilon R_n(q_k) \geq 0 . \\ \varepsilon \in \{-1, 1\} \quad k \in \mathbb{N}_0 .$$

Für solche Formeln gilt wegen (1.1.5) und der Stetigkeit von R_n auf $(C[-1, 1], \|\cdot\|_\infty)$

$$\|R_n\| = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|R_n(q_k)|}{r^k} = \left| \sum_{k=0}^{\infty} R_n(q_k/r^k) \right| = \left| R_n \left(\sum_{k=0}^{\infty} q_k/r^k \right) \right| .$$

Also ist wegen $\sum_{k=0}^{\infty} (x/r)^k = r/(r-x)$ für $|x| \leq 1$

$$(1.2.2) \quad \boxed{\|R_n\| = r |R_n(\varphi_1)|} \quad \text{mit } \varphi_1(x) := 1/(r-x) .$$

Für Quadraturformeln, die (1.2.1) erfüllen und zusätzlich ungerade Potenzen exakt integrieren, wird sich im folgenden die nächste Darstellung als nützlich erweisen.

Mit

$$(1.2.3) \quad \forall \quad R_n(q_{2k+1}) = 0 \\ k \in \mathbb{N}_0 .$$

folgt

$$\|R_n\| = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|R_n(q_k)|}{r^k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|R_n(q_{2k})|}{r^{2k}} = \left| R_n \left(\sum_{k=0}^{\infty} q_{2k}/r^{2k} \right) \right| ,$$

also

$$(1.2.4) \quad || R_n || = r^2 |R_n(\varphi_2)| \quad \text{mit } \varphi_2(x) := 1/(r^2 - x^2) \quad .$$

Alle symmetrischen Quadraturformeln, deren Restfunktional definit (von der Ordnung 2ℓ) ist, erfüllen die Voraussetzungen (1.2.1) und (1.2.3). Wegen der Symmetrie werden nämlich die ungeraden Potenzen durch die Quadraturformel exakt integriert, und wegen der Definitheit gilt (siehe z.B. Braß [6 ; S. 56 ff])

$$\forall f \in C^{2\ell}[-1,1] \quad \exists \xi \in [-1,1] \quad R_n(f) = \frac{R_n(q_{2\ell})}{(2\ell)!} f^{(2\ell)}(\xi),$$

woraus sich sofort ergibt, daß alle $R_n(q_{2k})$, $k \in \mathbb{N}_0$, einheitliches Vorzeichen haben. Von den symmetrischen Quadraturformeln mit definitivem Restfunktional seien hier die Gauß-Formeln für gerade Gewichtsfunktion w , die Lobatto-, Newton-Côtes-, zusammengesetzten Newton-Côtes- und die Filippi-Formeln genannt. Die Definitheit der Filippi-Formeln wurde für ungerades n von Locher [38] und für gerades n von Braß-Schmeißer [7] gezeigt, die Definitheit der anderen Quadraturformeln ist wohlbekannt (siehe z.B. Davis-Rabinowitz [20; S. 75, S. 80], Braß [6 ; S. 128]).

Wir haben einfache Darstellungen für $|| R_n ||$ unter den Voraussetzungen (1.2.1) bzw. (1.2.1) und (1.2.3) hergeleitet, da viele der üblichen Quadraturformeln diese Voraussetzungen erfüllen. Man kann aber auch unter anderen Voraussetzungen einfache Darstellungen für $|| R_n ||$ angeben. Ist etwa die Bedingung

$$(1.2.5) \quad \exists \varepsilon \in \{-1,1\} \quad \forall k \in \mathbb{N}_0 \quad \varepsilon (-1)^k R_n(q_k) \geq 0$$

erfüllt, so gilt

$$|| R_n || = \left| \sum_{k=0}^{\infty} \frac{R_n(q_{2k})}{r^{2k}} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{R_n(q_{2k+1})}{r^{2k+1}} \right| =$$

$$= r |R_n(\tilde{\varphi})| \quad \text{mit} \quad \tilde{\varphi}(x) := 1/(r+x) .$$

Wir werden im Abschnitt 1.7 sehen, daß die Radau-Formeln Q_n mit der Stützstelle -1 für $3 \leq n \leq 31$ der Bedingung (1.2.5) genügen.

Die Herleitung einer Darstellung von $\|R_n\|$ für interpolatorische Formeln schließt diesen Abschnitt ab. Eine Quadraturformel mit n Knoten heißt interpolatorisch, wenn sie Polynome vom Höchstgrad $n-1$ exakt integriert, wenn also gilt

$$(1.2.6) \quad \forall_{0 \leq k < n} \quad R_n(q_k) = 0 .$$

Wir gehen von der Darstellung (1.2.2) aus, setzen also auch in diesem Fall (1.2.1) voraus. Sei π_{n-1} das Polynom vom Höchstgrad $n-1$, welches φ_1 an den Stützstellen $x_1, \dots, x_n$ der Quadraturformel Q_n interpoliert. Dann gilt

$$\frac{1}{r-x} - \pi_{n-1}(x) = \frac{1 - (r-x) \pi_{n-1}(x)}{r-x} .$$

Der Zähler auf der rechten Seite dieser Gleichheit ist ein Polynom höchstens n -ten Grades, welches in $x_1, \dots, x_n$ verschwindet, da die linke Seite dort verschwindet; es gilt also

$$1 - (r-x) \pi_{n-1}(x) = \gamma \prod_{i=1}^n (x - x_i) .$$

Daraus folgt durch Grenzübergang ($x \rightarrow r$) $\gamma = 1 / \prod_{i=1}^n (r - x_i)$ (siehe Braß [6; S. 71 ff]). Wegen der Interpolationseigenschaft von π_{n-1} gilt $Q_n(\varphi_1) = Q_n(\pi_{n-1})$ und somit wegen (1.2.6) $Q_n(\varphi_1) = I(\pi_{n-1})$. Aus (1.2.2) ergibt sich damit

$$\|R_n\| = r \left| \int_{-1}^1 w(x) (\varphi_1(x) - \pi_{n-1}(x)) dx \right|$$

oder

$$(1.2.7) \quad \|R_n\| = r \left| \frac{1}{p_n(r) - 1} \int_{-1}^1 w(x) \frac{p_n(x)}{r-x} dx \right| \quad \text{mit} \quad p_n(x) := \prod_{i=1}^n (x - x_i) .$$

1.3 Eine optimale Abschätzung

In diesem Abschnitt führen wir einen neuen Beweis für die Abschätzung von Hämmerlin [28] für Gauß-Legendre-Quadraturformeln ($w(x) = 1$). Wir gehen dabei von der Darstellung (1.2.2) aus und machen Gebrauch von folgendem

Lemma 1 (Braß [6; S. 150])

Sei $f \in C^{2n+2}[-1,1]$ und $f^{(2n)}(x) \geq 0$, $f^{(2n+2)}(x) \geq 0$ für $x \in [-1,1]$. Dann gilt

$$(1.3.1) \quad 0 \leq R_n(f) \leq \frac{2^{2n} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^3} [f^{(2n-1)}(1) - f^{(2n-1)}(-1)];$$

dabei ist R_n das Fehlerfunktional der Gauß-Legendre-Quadraturformel mit n Knoten.

* * *

φ_1 erfüllt die Voraussetzungen dieses Lemmas, es gilt also

$$|R_n(\varphi_1)| \leq \frac{2^{2n} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^3} (2n-1)! \left[\frac{1}{(r-1)^{2n}} - \frac{1}{(r+1)^{2n}} \right]$$

und mit (1.2.2)

$$(1.3.2) \quad \|R_n\| \leq \frac{2^{2n} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^3} (2n-1)! \left[\frac{1}{(r-1)^{2n}} - \frac{1}{(r+1)^{2n}} \right] \\ =: c_n^H(r).$$

Diese Abschätzung leitet auch Hämmerlin her. Er geht von (1.1.5) aus, schätzt $R_n(q_k)$ für $k = 2v$, $v \geq n$, mit Hilfe von (1.3.1) ab und summiert auf ($R_n(q_k) = 0$ für $k \leq 2n-1$, da die Gauß-Formel Q_n Exaktheitsgrad $2n-1$ hat, und für $k = 2v-1$, $v \in \mathbb{N}_0$, wegen der Symmetrie).

Für $f \in X_\rho$ erhält man aus (1.3.2) die Abschätzung

$$(1.3.3) \quad |R_n(f)| \leq \inf_{1 < r < \rho} (\sigma_n^H(r) |f|_r) .$$

Da der Exaktheitsgrad der Gauß-Formel Q_n $2n-1$ ist, ergibt sich aus (1.1.6) mit $d=2n-1$

$$\|R_n\| \approx \frac{|R_n(q_{2n})|}{r^{2n}} \quad \text{für } r \rightarrow \infty .$$

Der Definition von σ_n^H entnimmt man

$$\begin{aligned} \sigma_n^H(r) &\approx \frac{2^{2n} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^3} (2n-1)! \frac{2 \cdot 2n}{r^{2n}} = \frac{2^{2n+1} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^2} \frac{1}{r^{2n}} = \\ &= \frac{|R_n(q_{2n})|}{r^{2n}} , \end{aligned}$$

es gilt also

$$(1.3.4) \quad \|R_n\| \approx \sigma_n^H(r) \quad \text{für } r \rightarrow \infty .$$

σ_n^H gibt also das richtige asymptotische Verhalten von $\|R_n\|$ für $r \rightarrow \infty$ wieder. Dies ist äquivalent dazu, daß in (1.3.3) für $f = q_{2n}$ ($q_{2n} \in X_\infty$) Gleichheit gilt. In diesem Sinne ist die Abschätzung (1.3.2) optimal.

Für $r \rightarrow 1+$ ist σ_n^H asymptotisch proportional zu $1/(r-1)^{2n}$,

$$(1.3.5) \quad \sigma_n^H(r) \sim 1/(r-1)^{2n} \quad \text{für } r \rightarrow 1+ ,$$

$$\text{d.h. } \lim_{r \rightarrow 1+} \frac{\sigma_n^H(r)}{\frac{1}{(r-1)^{2n}}} = \theta_n \neq 0 .$$

Da die Knoten der Gauß-Formel in $(-1,1)$ liegen, gilt andererseits

$$\| R_n \| \approx r \int_{-1}^1 \varphi_1(x) dx ,$$

also

$$(1.3.6) \quad \| R_n \| \approx \ln \frac{1}{r-1} \quad \text{für } r \rightarrow 1+ .$$

$\| R_n \|$ wird also für kleines r durch σ_n^H deutlich überschätzt.

Bemerkung: Die Gewichtsfunktion sei konstant, und die Bedingung (1.2.1) sei für eine Quadraturformel Q_n erfüllt. Aus (1.2.2) folgt, daß (1.3.6) gilt, solange die Knoten von Q_n in $[-1,1]$ liegen. Ist 1 Stützstelle von Q_n , so gilt

$$(1.3.7) \quad \| R_n \| \sim 1/(r-1) \quad \text{für } r \rightarrow 1+ .$$

Asymptotisches Verhalten für $n \rightarrow \infty$

Bisher war in diesem Abschnitt n fest, und wir haben das asymptotische Verhalten von $\| R_n \|$ und σ_n^H für $r \rightarrow \infty$ und $r \rightarrow 1+$ untersucht. Jetzt untersuchen wir für festes r das asymptotische Verhalten von $\| R_n \|$ und σ_n^H für $n \rightarrow \infty$.

Mit der Stirlingschen Formel

$$n! = \sqrt{2\pi n} n^n \exp(-n + \frac{\theta}{12n}) , \quad 0 \leq \theta_n \leq 1 ,$$

ergibt sich

$$\sigma_n^H(r) \geq \frac{\pi r}{8(n+1)} \left[\frac{1}{(2r-2)^{2n}} - \frac{1}{(2r+2)^{2n}} \right] ;$$

daraus folgt für $2r-2 < 1$ (also $r < 3/2$)

$$(1.3.8) \quad \sigma_n^H(r) \rightarrow \infty \quad \text{für } n \rightarrow \infty , \quad r \in (1, 1.5) .$$

Wegen der Konvergenz der Gauß-Formeln folgt andererseits aus (1.2.2)

$$(1.3.9) \quad \| R_n \| \rightarrow 0 \quad \text{für } n \rightarrow \infty , \quad r \in (1, \infty) .$$

1.4 Abschätzungen von $\|R_n\|$ mit approximationstheoretischen Mitteln

In diesem Abschnitt werden die Darstellungen (1.2.2) und (1.2.4) zugrundegelegt und Abschätzungen hergeleitet, die für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch proportional zu $1/(r-1)$ sind. Solche Abschätzungen sind in der Literatur bisher nicht bekannt. (1.3.7) entnimmt man, daß dieses Verhalten unter unseren allgemeinen Voraussetzungen nicht verbessert werden kann. Im Fall der Gauß-Legendre-Quadraturformeln ist diese Abschätzung für kleines r eine wesentliche Verbesserung der Abschätzung des vorigen Abschnitts.

Für die Herleitung der Abschätzungen benötigen wir einige approximationstheoretische Mittel.

Die beste Approximierende in der Tschebyscheff-Norm aus dem Raum $\mathbb{P}_d$ der Polynome vom Höchstgrad d an φ_1, φ_2 und der entsprechende Minimalabstand sind seit langem bekannt. Für die besten Approximierenden gibt es verschiedene Darstellungen (siehe z.B. Meinardus [41; S. 32 ff]). Wir verwenden hier zwei Darstellungen, die Spezialfälle der Ergebnisse von Rivlin [49] sind. Die Darstellung für die beste Approximierende an φ_1 und der Minimalabstand finden sich schon in Talbot [58] .

Wir fassen zuerst die Ergebnisse von Rivlin [49] zusammen:

Lemma 2 (Rivlin [49])

Seien $\mu, \nu \in \mathbb{N}_0$, $\mu > 0$ und

$$(1.4.1) \quad \varphi(x) := \sum_{j=0}^{\infty} t^j T_{\mu j + \nu}(x)$$

mit $|t| < 1$. Dann gilt

$$(1.4.2) \quad \varphi(x) = \frac{T_\nu(x) - tT_{|\mu-\nu|}(x)}{1+t^2 - 2tT_\mu(x)} .$$

Wenn $\mu k + \nu \leq d < \mu(k+1) + \nu$ und q_d^* die beste Approximierende an φ aus $\mathbb{P}_d$ in der Tschebyscheff-Norm ist, dann gilt

$$(1.4.3) \quad q_d^*(x) = \sum_{j=0}^k t^j T_{\mu j + \nu}(x) + \frac{t^{k+2}}{1-t^2} T_{\mu k + \nu}(x)$$

und für den Minimalabstand

$$(1.4.4) \quad E_d(\varphi) := \|\varphi - q_d^*\|_\infty = |t|^{k+1} / (1-t^2) .$$

T_i ist hierbei das i -te Tschebyscheff-Polynom erster Art.

Auch das folgende Korollar geht auf Rivlin zurück.

Korollar 1 (Rivlin [49])

Seien $a, b \in \mathbb{C}$, μ, ν, d, k und t wie in Lemma 2 und

$$(1.4.5) \quad \varphi(x) := b + a \sum_{j=0}^{\infty} t^j T_{\mu j + \nu}(x) .$$

Dann ist

$$(1.4.6) \quad \varphi(x) = \frac{b(1+t^2) - 2bt T_\mu(x) + aT_\nu(x) - at T_{|\mu-\nu|}(x)}{1+t^2 - 2t T_\mu(x)} ,$$

und für die beste Tschebyscheff-Approximierende q_d^* an φ aus $\mathbb{P}_d$ bzw. für den Minimalabstand $E_d(\varphi)$ gilt

$$(1.4.7) \quad q_d^*(x) = b + a \sum_{j=0}^k t^j T_{\mu j + \nu}(x) + a \frac{t^{k+2}}{1-t^2} T_{\mu k + \nu}(x)$$

bzw.

$$(1.4.8) \quad E_d(\varphi) := \|\varphi - q_d^*\|_\infty = |a| |t|^{k+1} / (1-t^2) .$$

Mit Korollar 1 läßt sich die beste Tschebyscheff-Approximierende p_d^* an φ_1 bzw. p_d^{**} an φ_2 aus $\mathbb{P}_d$ und der entsprechende Minimalabstand $E_d(\varphi_1)$ bzw. $E_d(\varphi_2)$ bestimmen.

Mit $t:=\tau:=r-\sqrt{r^2-1}$, $r > 1$, und $\mu:=1$, $\nu:=0$, $a:=4\tau/(1-\tau^2)$ und $b:=-2\tau/(1-\tau^2)$ ergibt sich aus (1.4.6) $\varphi(x)=1/(r-x)$, also $\varphi=\varphi_1$. Aus Korollar 1 folgt dann

$$(1.4.9) \quad p_d^*(x) = \frac{2\tau}{1-\tau^2} [-1 + 2 \sum_{j=0}^{d-1} \tau^j T_j(x)] + \frac{4\tau^{d+1}}{(1-\tau^2)^2} T_d(x)$$

und

$$(1.4.10) \quad E_d(\varphi_1) = \|\varphi_1 - p_d^*\|_{\infty} = 4\tau^{d+2}/(1-\tau^2)^2.$$

Dieses Resultat findet sich ebenfalls bei Rivlin [49] als Anwendung seiner Ergebnisse und geht, wie schon erwähnt, auf Talbot [58] zurück.

Mit $t:=\tau^2 = (r-\sqrt{r^2-1})^2$, $r > 1$, und $\mu:=2$, $\nu:=0$, $a:=8\tau^2/(1-\tau^4)$ und $b:=-4\tau^2/(1-\tau^4)$ ergibt sich aus (1.4.6) $\varphi(x) = 1/(r^2-x^2)$, also $\varphi=\varphi_2$. Aus Korollar 1 folgt jetzt:

$$(1.4.11) \quad p_d^{**}(x) = \frac{4\tau^2}{1-\tau^4} [-1 + 2 \sum_{j=0}^{d-1} \tau^{2j} T_{2j}(x)] + \frac{8\tau^{2d'+2}}{(1-\tau^4)^2} T_{2d'}(x)$$

und

$$(1.4.12) \quad E_d(\varphi_2) = \|\varphi_2 - p_d^{**}\|_{\infty} = 8\tau^{2d'+4}/(1-\tau^4)^2$$

mit $d':= [d/2]$.

Die Kenntnisse über p_d^* und $E_d(\varphi_1)$ bzw. p_d^{**} und $E_d(\varphi_2)$ wollen wir nun ausnutzen, um neue Fehlerschranken herzuleiten.

Abschätzungen mit (1.2.2)

Wir setzen zuerst (1.2.1) voraus und leiten mit Hilfe von (1.4.9) und (1.4.10), ausgehend von der Darstellung (1.2.2), Abschätzungen für $\|R_n\|$ her.

Hat eine Quadraturformel Exaktheitsgrad d , so gilt für das Restglied

$$\begin{aligned} R_n(\varphi_1) &= R_n(\varphi_1) - R_n(p_d^*) \\ &= \int_{-1}^1 w(x) [\varphi_1(x) - p_d^*(x)] dx - \sum_{i=1}^n w_i [\varphi_1(x_i) - p_d^*(x_i)] , \end{aligned}$$

also

$$\begin{aligned} (1.4.13) \quad |R_n(\varphi_1)| &\leq \\ &\leq \left| \int_{-1}^1 w(x) [\varphi_1(x) - p_d^*(x)] dx \right| + \sum_{i=1}^n |w_i| |\varphi_1(x_i) - p_d^*(x_i)| \\ &\leq \| \varphi_1 - p_d^* \|_{\infty} \left(\|w\|_1 + \sum_{i=1}^n |w_i| \right) . \end{aligned}$$

Damit folgt aus (1.2.2) und (1.4.10)

$$\|R_n\| \leq 4r \left(\|w\|_1 + \sum_{i=1}^n |w_i| \right) \tau^{d+2} / (1-\tau^2)^2 ,$$

d.h.

$$(1.4.14) \quad \|R_n\| \leq r \left(\|w\|_1 + \sum_{i=1}^n |w_i| \right) \tau^d / (r^2 - 1) , \quad \tau = r - \sqrt{r^2 - 1} .$$

Sind die Gewichte nichtnegativ, so gilt

$$\sum_{i=1}^n |w_i| = \sum_{i=1}^n w_i = \int_{-1}^1 w(x) dx = \|w\|_1 ,$$

und (1.4.14) vereinfacht sich zu

$$(1.4.15) \quad \|R_n\| \leq 2r \|w\|_1 \tau^d / (r^2 - 1) .$$

Bemerkung: Im folgenden werden Quadraturformeln mit negativen Gewichten nicht betrachtet. Zum einen ist dieser Fall ohnehin nicht interessant, und zum anderen lassen sich die entsprechenden Resultate analog herleiten.

Schätzt man den ersten Term auf der rechten Seite von (1.4.13) genauer ab, so erhält man natürlich eine bessere Abschätzung als in (1.4.15). Dies führen wir für zwei spezielle Gewichtsfunktionen aus.

Zunächst betrachten wir den Spezialfall $w(x) := 1$. Sei

$$I_d(\varphi_1) := \int_{-1}^1 [\varphi_1(x) - p_d^*(x)] dx .$$

Für $j \in \mathbb{N}$ gilt

$$(1.4.16) \quad \int_{-1}^1 T_j(x) dx = \begin{cases} 0 & , \text{ für } j \text{ ungerade} \\ -2/(j^2-1) & , \text{ für } j \text{ gerade} , \end{cases}$$

denn für ungerades j ist T_j eine ungerade Funktion, das Integral verschwindet also, und für gerades j folgt (1.4.16) aus

$$\int T_j(x) dx = [T_{j+1}(x)/(j+1) - T_{j-1}(x)/(j-1)]/2 + c$$

(siehe z.B. Rivlin [50; S. 5]).

Wir unterscheiden nun zwei Fälle:

1. Fall: d ungerade , $d=2k+1$

Wegen (1.4.9) und (1.4.16) gilt

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 p_d^*(x) dx &= \frac{4\tau}{1-\tau^2} \left\{ 1 + \sum_{j=1}^k \tau^{2j} [1/(2j+1) - 1/(2j-1)] \right\} \\ &= \frac{4\tau}{1-\tau^2} \left\{ \tau^{d+1}/d + (1/\tau - \tau) \sum_{j=0}^k \tau^{2j+1}/(2j+1) \right\} \\ &= \frac{4\tau^{d+2}}{d(1-\tau^2)} + 4 \sum_{j=0}^k \frac{\tau^{2j+1}}{2j+1} , \end{aligned}$$

also

$$(1.4.17) \quad I_d(\varphi_1) = \ln \frac{r+1}{r-1} - \frac{4\tau^{d+2}}{d(1-\tau^2)} - 4 \sum_{j=0}^{\kappa} \frac{\tau^{2j+1}}{2j+1},$$

$$\text{oder mit } \frac{r+1}{r-1} = \left(\frac{1+\tau}{1-\tau} \right)^2$$

$$\begin{aligned} I_d(\varphi_1) &= -4 \frac{\tau^{d+2}}{d(1-\tau^2)} + 4 \sum_{j=\kappa+1}^{\infty} \frac{\tau^{2j+1}}{2j+1} \\ &\leq -\frac{4\tau^{d+2}}{1-\tau^2} \left(\frac{1}{d} - \frac{1}{d+2} \right) \leq 0, \end{aligned}$$

und damit

$$(1.4.18) \quad |I_d(\varphi_1)| \leq \frac{4\tau^{d+2}}{d(1-\tau^2)}.$$

Mit (1.4.18) läßt sich (1.4.15) verbessern zu

$$(1.4.19) \quad \|R_n\| \leq 2r \left(\frac{\tau}{d\sqrt{r^2-1}} + \frac{1}{r^2-1} \right) \tau^d, \quad d \text{ ungerade.}$$

Die Abschätzung (1.4.18), die sich sehr einfach verbessern läßt, stellt einen Kompromiß zwischen Genauigkeit und Einfachheit dar. Für sehr kleines d läßt sich $I_d(\varphi_1)$ aus (1.4.17) einfach auswerten, und man braucht keine Abschätzung dafür. Für größeres d kann die Abschätzung (1.4.18) ohne nennenswerten Verlust an Genauigkeit verwendet werden, da der erste der eingeklammerten Terme in (1.4.19) im Verhältnis zum zweiten sehr klein ist.

2. Fall: d gerade, $d=2\kappa$

Analog zum ersten Fall ergibt eine einfache Rechnung

$$\begin{aligned} (1.4.20) \quad I_d(\varphi_1) &= \ln \frac{r+1}{r-1} - \frac{4\tau^{d+1}}{(d-1)(1-\tau^2)} - 4 \sum_{j=0}^{\kappa-1} \frac{\tau^{2j+1}}{2j+1} \\ &\quad + \frac{8\tau^{d+1}}{(d^2-1)(1-\tau^2)^2}, \end{aligned}$$

woraus

$$(1.4.21) \quad |I_d(\varphi_1)| \leq \frac{8\tau^{d+3}}{(d-1)(1-\tau^2)^2}$$

folgt. Damit läßt sich (1.4.15) verbessern zu

$$(1.4.22) \quad \|R_n\| \leq 2r [1 + \tau/(d-1)] \tau^d / (r^2 - 1) \quad , \quad d \text{ gerade.}$$

$I_d(\varphi_1)$ wurde in (1.4.22) relativ grob abgeschätzt (was nur geringen Einfluß auf die Genauigkeit der erhaltenen Abschätzungen für $\|R_n\|$ hat), damit die Schranke möglichst einfach wird.

Jetzt kommen wir zum zweiten Spezialfall, nämlich $w(x) := 1/\sqrt{1-x^2}$. Sei

$$J_d(\varphi_1) := \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} [\varphi_1(x) - p_d^*(x)] dx .$$

Wegen der Orthogonalität der Tschebyscheff-Polynome erster Art bezüglich $1/\sqrt{1-x^2}$ gilt $(T_0(x)=1)$

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} p_d^*(x) dx = \frac{2\tau}{1-\tau^2} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx = \frac{2\pi\tau}{1-\tau^2} ,$$

also

$$J_d(\varphi_1) = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{1}{r-x} dx - \frac{2\pi\tau}{1-\tau^2} = 0 ,$$

und somit verbessert sich (1.4.15) in diesem Fall zu

$$(1.4.23) \quad \|R_n\| \leq \pi r \tau^d / (r^2 - 1) .$$

Abschätzungen mit (1.2.4)

Wir wenden uns jetzt Quadraturformeln zu, welche außer (1.2.1) auch (1.2.3) erfüllen, ungerade Potenzen also exakt

integrieren. In diesem Fall steht uns die Darstellung (1.2.4) zur Verfügung, also

$$\|R_n\| = r^2 |R_n(\varphi_2)| \quad \text{mit} \quad \varphi_2(x) = 1/(r^2 - x^2) .$$

Damit können wir die bisherigen Ergebnisse dieses Abschnitts verbessern.

Hat eine Quadraturformel Exaktheitsgrad d , so gilt

$$\begin{aligned} (1.4.24) \quad |R_n(\varphi_2)| &\leq \\ &\leq \left| \int_{-1}^1 w(x) [\varphi_2(x) - p_d^{**}(x)] dx \right| + \sum_{i=1}^n |w_i| |\varphi_2(x_i) - p_d^{**}(x_i)| \\ &\leq 2 \|w\|_1 \|\varphi_2 - p_d^{**}\|_{\infty} . \end{aligned}$$

Damit folgt aus (1.2.4) und (1.4.12)

$$\|R_n\| \leq 16r^2 \|w\|_1 \tau^{2d'+4}/(1-\tau^4)^2 ,$$

d.h.

$$(1.4.25) \quad \|R_n\| \leq \|w\|_1 \tau^{2d'}/(r^2-1) , \quad d' = [d/2] .$$

Die Abschätzung (1.4.25) ist genauer als (1.4.15).

Für zwei spezielle Gewichtsfunktionen ($w(x)=1$ und $w(x)=1/\sqrt{1-x^2}$) verbessern wir (1.4.25) dadurch, daß wir den ersten Term in (1.4.24) genauer abschätzen bzw. berechnen.

Sei zunächst $w(x) = 1$ und

$$I_d(\varphi_2) := \int_{-1}^1 [\varphi_2(x) - p_d^{**}(x)] dx .$$

Eine leichte Rechnung liefert

$$(1.4.26) \quad I_d(\varphi_2) = \frac{1}{r} \ln \frac{r+1}{r-1} - \frac{8\tau}{1+\tau^2} \sum_{j=0}^{d'-1} \tau^{2j+1} / (2j+1) \\ - \frac{8\tau^{2d'+2}}{(2d'-1)(1-\tau^4)} + \frac{16\tau^{2d'+2}}{(4d'^2-1)(1-\tau^4)^2} ,$$

und eine weitere Umformung ergibt

$$I_d(\varphi_2) = - \frac{8\tau^{2d'+4} [2 + (2d'+1)\tau^2]}{(2d'+1)(2d'+3)(1-\tau^4)} + \frac{8\tau^2}{1+\tau^2} \sum_{j=d'+2}^{\infty} \frac{\tau^{2j}}{2j+1} \leq 0 .$$

Daraus folgt schließlich

$$(1.4.27) \quad |I_d(\varphi_2)| \leq \frac{8\tau^{2d'+4} [2 + (2d'+1)\tau^2]}{(2d'+1)(2d'+3)(1-\tau^4)} ,$$

und damit verbessert sich (1.4.25) zu

$$(1.4.28) \quad ||R_n|| \leq \left\{ \frac{2r\tau^2 [2 + (2d'+1)\tau^2]}{(2d'+1)(2d'+3)} + \frac{1}{\sqrt{r^2-1}} \right\} \frac{\tau^{2d'}}{\sqrt{r^2-1}}$$

mit $d' = [d/2]$ und $\tau = r - \sqrt{r^2-1}$.

Für die Gewichtsfunktion $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$ gilt wegen der Orthogonalität der Tschebyscheff-Polynome

$$J_d(\varphi_2) := \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} [\varphi_2(x) - p_d^{**}(x)] dx = 0 ,$$

und mit (1.4.24) und (1.4.12) ergibt sich

$$(1.4.29) \quad ||R_n|| \leq \frac{\pi \tau^{2d'}}{2(r^2-1)} , \quad d' = [d/2] .$$

Nach diesen allgemeinen Betrachtungen wenden wir uns nun konkreten Quadraturverfahren zu, d.h. Folgen von Quadraturformeln mit wachsendem Exaktheitsgrad.

a. Gauß-Verfahren

Die Gewichtsfunktion w sei gerade. Die Gauß-Quadraturformeln sind dann symmetrisch, denn sonst wäre mit $Q_n(f) := \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$ auch $\tilde{Q}_n(f) := \sum_{i=1}^n w_i f(-x_i)$ eine Gauß-Formel im Widerspruch zur Eindeutigkeit der Gauß-Formeln.

Die Gauß-Formeln sind bekanntlich definit (siehe etwa Davis-Rabinowitz [20; S. 75]), die Bedingungen (1.2.1) und (1.2.3) sind also erfüllt. Die Gewichte sind alle positiv und der Exaktheitsgrad ist $2n-1$. Mit $d=2n-1$ erhalten wir aus (1.4.25)

$$(1.4.30) \quad \|R_n\| \leq \|w\|_1 \tau^{2n-2}/(r^2-1) \quad , \quad \tau = r - \sqrt{r^2-1} \quad .$$

Für den wichtigen Spezialfall der Gauß-Gegenbauer-Formeln, also Gauß-Formeln zur Gewichtsfunktion $w(x) = (1-x^2)^\alpha$, $\alpha > -1$, bedeutet dies

$$(1.4.31) \quad \|R_n\| \leq 2^{2\alpha+1} \frac{[\Gamma(\alpha+1)]^2}{\Gamma(2\alpha+2)} \tau^{2n-2}/(r^2-1) \quad .$$

Für die Gauß-Legendre-Quadraturformeln ($w(x)=1$) können wir (1.4.28) verwenden und erhalten

$$(1.4.32) \quad \|R_n\| \leq \left\{ \frac{2r\tau^2[2+(2n-1)\tau^2]}{4n^2-1} + \frac{1}{\sqrt{r^2-1}} \right\} \frac{\tau^{2n-2}}{\sqrt{r^2-1}} \\ =: \sigma_n^A(r) \quad .$$

σ_n^A (A steht für Approximationstheorie) ist für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch proportional zu $1/(r-1)$, während $\sigma_n^H(r) \sim 1/(r-1)^{2n}$ ist, siehe (1.3.5). Andererseits gilt aber $\sigma_n^H \approx \|R_n\|$ für $r \rightarrow \infty$ (siehe (1.3.4)), während für σ_n^A gilt

$$(1.4.33) \quad \sigma_n^A \approx \frac{n^2(2n+1)[(2n)!]^2}{2^{4n-3}(4n^2-1)(n!)^4} \|R_n\| \quad ;$$

dies folgt aus (1.4.32) und

$$\| R_n \| \approx \frac{|R_n(q_{2n})|}{r^{2n}} = \frac{2^{2n+1} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^2} \frac{1}{r^{2n}}$$

(siehe auch Abschnitt 1.8).

Numerische Beispiele zum Vergleich von σ_n^H und σ_n^A werden im Abschnitt 1.8 angegeben.

Für die Gauß-Tschebyscheff-Formeln ($w(x)=1/\sqrt{1-x^2}$) können wir (1.4.29) verwenden und erhalten

$$(1.4.34) \quad \| R_n \| \leq \frac{\pi \tau^{2n-2}}{2(r^2-1)} .$$

b. Lobatto-Verfahren

Die Lobatto-Formeln sind symmetrisch und definit. Die Gewichte sind positiv, die Gewichtsfunktion $w(x)=1$, und der Exaktheitsgrad der Formel mit n Knoten ist $2n-3$ (siehe z.B. Davis-Rabinowitz [20; S. 80]). Aus (1.4.28) ergibt sich

$$(1.4.35) \quad \| R_n \| \leq \left\{ \frac{2r\tau^2 [2+(2n-3)\tau^2]}{(2n-3)(2n-1)} + \frac{1}{\sqrt{r^2-1}} \right\} \frac{\tau^{2n-4}}{\sqrt{r^2-1}} .$$

Wegen der Symmetrie und der Definitheit sind die Voraussetzungen (1.2.1) und (1.2.3) erfüllt.

c. Filippi-Verfahren

Die Gewichte sind positiv, $w(x)=1$, und der Exaktheitsgrad der Filippi-Formeln mit n Knoten ist $2n'-1$ mit $n':=[\frac{n+1}{2}]$. Die Formeln sind symmetrisch, ihre Definitheit wurde für ungerades bzw. gerades n von Locher [38] bzw. von Braß-Schmeißer [7] bewiesen. (1.2.1) und (1.2.3) sind also erfüllt, und aus (1.4.28) ergibt sich

$$(1.4.36) \quad \| R_n \| \leq \left\{ \frac{2\tau^2 [2 + (2n'-1)\tau^2]}{(2n'-1)(2n'+1)} + \frac{1}{\sqrt{\tau^2-1}} \right\} \frac{\tau^{2n'-2}}{\sqrt{\tau^2-1}}.$$

Zusammenfassung der Resultate dieses Abschnittes:

Ausgangspunkt waren die Darstellungen (1.2.2) und (1.2.4). Mit einem allgemeinen, approximationstheoretischen Ergebnis von Rivlin wurden die besten Tschebyscheff-Approximierenden p_d^* , p_d^{**} aus dem Raum $\mathbb{P}_d$ an die in (1.2.2) bzw. (1.2.4) definierten Funktionen φ_1 bzw. φ_2 und der zugehörige Minimalabstand bestimmt. Durch einfache Abschätzungen (siehe (1.4.13) und (1.4.24)) leiteten wir Schranken für die Norm des Fehlerfunktionalen für eine Klasse von Quadraturformeln her, genauer für Quadraturformeln, die den Bedingungen (1.2.1) bzw. (1.2.1) und (1.2.3) genügen.

Für zwei spezielle Gewichtsfunktionen wurden unsere Ergebnisse dadurch verbessert, daß

$$\left| \int_{-1}^1 w(x) [\varphi_1(x) - p_d^*(x)] dx \right| \quad \text{bzw.} \quad \left| \int_{-1}^1 w(x) [\varphi_2(x) - p_d^{**}(x)] dx \right|$$

genauer als durch

$$\| w \|_1 \| \varphi_1 - p_d^* \|_\infty \quad \text{bzw.} \quad \| w \|_1 \| \varphi_2 - p_d^{**} \|_\infty$$

abgeschätzt wurde.

Alle Schranken dieses Abschnitts verhalten sich für $r \rightarrow 1+$ wie $1/(r-1)$. Die Schranke σ_n^H von Hämmerlin [28] für die Norm des Restfunktionalen der Gauß-Legendre-Formel Q_n , die sich für $r \rightarrow 1+$ wie $1/(r-1)^{2n}$ verhält, wird somit durch σ_n^A für kleines r deutlich verbessert.

Andererseits gilt aber für $r \rightarrow \infty$ $\sigma_n^H \cong ||R_n||$, während σ_n^A zwar asymptotisch proportional, aber nicht asymptotisch gleich $||R_n||$ ist (siehe (1.4.32)).

Die Abschätzungen, die wir mit Hilfe von (1.2.4) erhielten, sind genauer als die entsprechenden, die mit Hilfe von (1.2.2) hergeleitet wurden.

1.5 Abschätzung von $\|R_n\|$ durch Entwicklung nach Tschebyscheff-Polynomen

Im vorigen Abschnitt wurden Abschätzungen für $\|R_n\|$ hergeleitet, die für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch proportional zu $1/(r-1)$ sind, was sich unter unseren allgemeinen Voraussetzungen nicht verbessern läßt. Wir sahen aber andererseits, daß die Abschätzung von Hämmerlin [28] für Gauß-Legendre-Formeln für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ ist, während für σ_n^A dies nicht der Fall ist (siehe (1.4.33)).

Ziel dieses Abschnitts soll es sein, Abschätzungen herzuleiten, die sich für $r \rightarrow 1+$ wie $1/(r-1)$ verhalten und für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ sind. Dies wird durch Entwicklung der Funktionen φ_1 und φ_2 nach Tschebyscheff-Polynomen erreicht.

Die Funktionen φ_1 und φ_2 können wie folgt nach Tschebyscheff-Polynomen erster Art (T_j) bzw. zweiter Art (U_j) entwickelt werden:

$$(1.5.1) \quad \varphi_1(x) = \frac{1}{r-x} = \frac{2}{\sqrt{r^2-1}} \sum_{j=0}^{\infty} \tau^j T_j(x) ,$$

$$(1.5.2) \quad \varphi_2(x) = \frac{1}{r^2-x^2} = \frac{2}{r\sqrt{r^2-1}} \sum_{j=0}^{\infty} \tau^{2j} T_{2j}(x) ,$$

$$(1.5.3) \quad \varphi_1(x) = 2\tau \sum_{j=0}^{\infty} \tau^j U_j(x) ,$$

$$(1.5.4) \quad \varphi_2(x) = \frac{2\tau}{r} \sum_{j=0}^{\infty} \tau^{2j} U_{2j}(x)$$

mit $r > 1$ und $\tau = r - \sqrt{r^2-1}$.

Der Strich beim Summationszeichen (Σ') bedeutet wie üblich, daß der erste Summand halbiert werden muß.

Die Reihen konvergieren in $[-1,1]$ gleichmäßig, wie man aus dem Weierstraßschen Kriterium sofort sieht.

Zur Entwicklung einer Funktion nach Orthogonalpolynomen siehe z.B. Szegő [57; Chap. IX], für Tschebyscheff-Polynome erster Art auch Rivlin [50; Chap. 3]. (1.5.1) und (1.5.2) folgen auch direkt aus Korollar 1.

Sei d der Exaktheitsgrad einer Quadraturformel und R_n ihr Fehlerfunktional. Wegen der Stetigkeit von R_n und der gleichmäßigen Konvergenz der Reihen kann R_n mit der Summation vertauscht werden, es gilt also nach (1.5.1)

$$R_n(\varphi_1) = \frac{2}{\sqrt{r^2-1}} R_n \left(\sum_{j=0}^{\infty} \tau^j T_j \right) = \frac{2}{\sqrt{r^2-1}} \sum_{j=d+1}^{\infty} \tau^j R_n(T_j) .$$

Daraus ergibt sich mit (1.2.2)

$$(1.5.5) \quad ||R_n|| = \frac{2r}{\sqrt{r^2-1}} \left| \sum_{j=d+1}^{\infty} \tau^j R_n(T_j) \right| .$$

Entsprechend erhält man aus (1.2.2) und (1.5.3)

$$(1.5.6) \quad ||R_n|| = 2\tau r \left| \sum_{j=d+1}^{\infty} \tau^j R_n(U_j) \right| .$$

Für symmetrische Quadraturformeln erhält man aus (1.2.2) mit (1.5.1) bzw. (1.5.3)

$$(1.5.7) \quad ||R_n|| = \frac{2r}{\sqrt{r^2-1}} \left| \sum_{j=d'}^{\infty} \tau^{2j} R_n(T_{2j}) \right|$$

bzw.

$$(1.5.8) \quad ||R_n|| = 2\tau r \left| \sum_{j=d'}^{\infty} \tau^{2j} R_n(U_{2j}) \right| , d' = [d/2] + 1 ,$$

da T_{2j+1} und U_{2j+1} , $j \in \mathbb{N}_0$, als ungerade Funktionen durch symmetrische Formeln exakt integriert werden.

Bemerkung: Geht man von (1.2.4) aus, so erhält man mit (1.5.2) bzw. (1.5.4) wieder die Darstellungen (1.5.7) bzw. (1.5.8). Aus diesem Grund wird im folgenden von den Entwicklungen (1.5.2), (1.5.4) nicht Gebrauch gemacht.

Wir wenden nun diese Darstellungen von R_n auf einige konkrete Quadraturverfahren an:

a. Gauß-Verfahren

Die Gewichtsfunktion w sei gerade. Wir gehen von (1.5.7) bzw. (1.5.8) (mit $d'=n$) aus und gewinnen Abschätzungen für $\|R_n\|$ dadurch, daß wir $R_n(T_{2n})$ und $R_n(T_{2n+2})$ bzw. $R_n(U_{2n})$ und $R_n(U_{2n+2})$ berechnen und $R_n(T_{2n+2k})$ bzw. $R_n(U_{2n+2k})$ für $k \geq 2$ abschätzen.

$R_n(T_{2n})$ und $R_n(U_{2n})$ lassen sich sehr einfach aus der klassischen Darstellung des Integrationsfehlers berechnen, da die $2n$ -te Ableitung konstant ist. Um $R_n(T_{2n+2})$ und $R_n(U_{2n+2})$ zu berechnen, benötigen wir $R_n(q_{2n+2})$, $q_{2n+2}(x) = x^{2n+2}$. Dazu fassen wir zunächst einige wichtige, wohlbekannte Eigenschaften von Orthogonalpolynomen und Gauß-Quadraturformeln zusammen (siehe etwa Davis [18; S. 234 ff] und Davis-Rabinowitz [20; S. 73 ff]).

Sei

$$(f, g)_w := \int_{-1}^1 w(x) f(x) g(x) dx,$$

und $\{p_k : k \in \mathbb{N}_0\}$ seien bezüglich $(\dots)_w$ orthonormierte Polynome mit

$$(1.5.9) \quad p_k(x) = \alpha_k x^{k+\beta_k} + \pi_{k-4}(x), \quad \text{Grad } \pi_{k-4} \leq k-4, \alpha_k > 0.$$

Es sei hier erwähnt, daß p_{2k+1} bzw. p_{2k} , $k \in \mathbb{N}_0$, ungerade bzw. gerade Funktionen sind, da die Gewichtsfunktion als gerade vorausgesetzt ist. Diese Folge von Polynomen ist

eindeutig bestimmt, und es gilt die Rekursionsformel

$$(1.5.10) \quad p_k(x) = a_k x p_{k-1}(x) - b_k p_{k-2}(x)$$

mit

$$(1.5.11) \quad a_k = \alpha_k / \alpha_{k-1} \quad \text{und} \quad b_k = \alpha_k \alpha_{k-2} / \alpha_{k-1}^2$$

(Davis [18; S. 234 ff]).

Sind x_i , $i=1, \dots, n$, die Stützstellen der Gauß-Quadraturformel zur Gewichtsfunktion w , p_k und α_k wie oben definiert und $f \in C^{2n}[-1, 1]$, so gibt es $\xi \in (-1, 1)$ mit

$$(1.5.12) \quad R_n(f) = \int_{-1}^1 w(x) f(x) dx - Q_n(f) = -\frac{1}{(2n)! \alpha_n^2} f^{(2n)}(\xi).$$

Speziell für $w(x) := (1-x^2)^\alpha$, $\alpha > -1$, gilt

$$(1.5.13) \quad R_n(f) = \frac{2^{2n+2\alpha+1} [\Gamma(n+\alpha+1)]^2 \Gamma(n+2\alpha+1) n!}{\Gamma(2n+2\alpha+1) \Gamma(2n+2\alpha+2) (2n)!} f^{(2n)}(\xi)$$

und für $w(x) := 1$ (also $\alpha=0$)

$$(1.5.14) \quad R_n(f) = \frac{2^{2n+1} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi),$$

siehe Davis-Rabinowitz [20; S. 75].

Da die Gauß-Formel Q_n Exaktheitsgrad $2n-1$ hat, schreibt sich (1.5.7) bzw. (1.5.8) als

$$(1.5.15) \quad \|R_n\| = \frac{2r}{\sqrt{r^2-1}} \left| \sum_{j=n}^{\infty} \tau^{2j} R_n(T_{2j}) \right|$$

bzw.

$$(1.5.16) \quad \|R_n\| = 2\tau r \left| \sum_{j=n}^{\infty} \tau^{2j} R_n(U_{2j}) \right|.$$

Für die Koeffizienten der Tschebyscheff-Polynome erster Art

$$T_j(x) = t_j^{(j)} x^j + t_{j-1}^{(j)} x^{j-1} + \dots + t_0^{(j)}$$

$$\text{gilt } t_{j-2i}^{(j)} = (-1)^i j \binom{j-i}{i} 2^{j-2i-1} / (j-i), \quad i=0, \dots, [j/2],$$

und

$$t_{j-(2i+1)}^{(j)} = 0, \quad i=0, \dots, \left[\frac{j-1}{2}\right]$$

(Rivlin [50; S. 32]), insbesondere gilt also $t_j^{(j)} = 2^{j-1}$ und $t_{j-2}^{(j)} = -j 2^{j-3}$.

Die Koeffizienten $u_i^{(j)}, i=0, \dots, j$, von U_j lassen sich wegen der Beziehung $U_j = T_{j+1}' / (j+1)$ (Rivlin [50; S. 7]) aus den Koeffizienten von T_j sehr einfach berechnen.

Aus $R_n(T_{2n}) = t_{2n}^{(2n)} R_n(q_{2n})$, $R_n(U_{2n}) = u_{2n}^{(2n)} R_n(q_{2n})$ und (1.5.12) ergibt sich

$$(1.5.17) \quad R_n(T_{2n}) = 2^{2n-1} / \alpha_n^2$$

und

$$(1.5.18) \quad R_n(U_{2n}) = 2^{2n} / \alpha_n^2.$$

Um $R_n(T_{2n+2})$ und $R_n(U_{2n+2})$ zu berechnen, benötigen wir $R_n(q_{2n+2})$, zu dessen Berechnung wir Braß [6; S. 157] folgen, der den Spezialfall der Gauß-Legendre-Formeln behandelt. Wir gehen aus von (siehe (1.5.9))

$$(1.5.19) \quad p_{n+2}(x)p_n(x) = \alpha_{n+2}\alpha_n x^{2n+2} + (\alpha_{n+2}\beta_n + \alpha_n\beta_{n+2})x^{2n} \\ + \pi_{2n-2}(x)$$

mit $\text{Grad } \pi_{2n-2} \leq 2n-2$. Da $(p_{n+2}, p_n)_w = 0$, $Q_n(p_{n+2}p_n) = 0$

und $R_n(\pi_{2n-2}) = 0$ gilt, ergibt sich hieraus

$$R_n(q_{2n+2}) = C_n R_n(q_{2n})$$

mit

$$(1.5.20) \quad C_n := -\beta_n/\alpha_n - \beta_{n+2}/\alpha_{n+2}.$$

Damit erhält man aus

$$R_n(T_{2n+2}) = t_{2n+2}^{(2n+2)} R_n(q_{2n+2}) + t_{2n}^{(2n+2)} R_n(q_{2n})$$

$$(1.5.21) \quad R_n(T_{2n+2}) = 2^{2n}(2C_n - n - 1)/\alpha_n^2$$

und analog

$$(1.5.22) \quad R_n(U_{2n+2}) = 2^{2n}(4C_n - 2n - 1)/\alpha_n^2.$$

Bemerkung: Für Gauß-Legendre-Quadraturformeln geben Nicholson-Rabinowitz-Richter-Zeilberger [45] $R_n(T_{2n})$, $R_n(T_{2n+2})$ und $R_n(T_{2n+4})$ an.

Nun schätzen wir $R_n(T_{2j})$ und $R_n(U_{2j})$ für $j \geq n+2$ ab:

$$|R_n(T_{2j})| \leq \int_{-1}^1 w(x) |T_{2j}(x)| dx + \sum_{i=1}^n w_i |T_{2j}(x_i)|,$$

und mit $\|T_{2j}\|_{\infty} = 1$ folgt

$$(1.5.23) \quad |R_n(T_{2j})| \leq 2\|w\|_1.$$

Analog erhält man mit $\|U_{2j}\|_{\infty} = 2j+1$

$$(1.5.24) \quad |R_n(U_{2j})| \leq 2(2j+1) \|w\|_1.$$

Aus (1.5.15) folgt

$$\| R_n \| \leq \frac{2r}{\sqrt{r^2-1}} \{ \tau^{2n} | R_n(T_{2n}) + \tau^2 R_n(T_{2n+2}) | + \sum_{j=n+2}^{\infty} \tau^{2j} | R_n(T_{2j}) | \},$$

und mit (1.5.17), (1.5.21) und (1.5.23) ergibt sich

$$(1.5.25) \quad \| R_n \| \leq \frac{2r\tau^{2n}}{\sqrt{r^2-1}} \left\{ \frac{2^{2n-1}}{\alpha_n^2} | 1 + 2\tau^2 (2C_n - n - 1) | + \frac{\tau^3}{\sqrt{r^2-1}} \| w \|_1 \right\}.$$

Analog erhält man aus (1.5.16), (1.5.18), (1.5.22) und (1.5.24)

$$(1.5.26) \quad \| R_n \| \leq 2r\tau^{2n+1} \left\{ \frac{2^{2n}}{\alpha_n^2} | 1 + \tau^2 (4C_n - 2n - 1) | + \tau^2 \frac{(2n+5) - (2n+3)\tau^2}{2(r^2-1)} \| w \|_1 \right\}.$$

Dabei ist $\tau = r - \sqrt{r^2-1}$ und C_n in (1.5.20) definiert.

Bemerkung: Man kann $R_n(T_{2n+2k})$ für $2 \leq k \leq \ell$ (ℓ fest) analog zu $R_n(T_{2n+2})$ berechnen und damit genauere Schranken als in (1.5.25) erhalten. Auch (1.5.26) läßt sich analog verbessern. (1.5.25) und (1.5.26) stellen einen Kompromiß zwischen Genauigkeit und Einfachheit dar.

Gauß-Gegenbauer-Quadraturformeln

Für den wichtigen Spezialfall der Gauß-Gegenbauer-Formeln, also für $w(x) := (1-x^2)^\alpha$, $\alpha > -1$, schreiben wir die Schranken in (1.5.25) und (1.5.26) aus. Dazu einige Vorbereitungen (Szegő [57; S. 66 ff]).

Die Jacobi-Polynome $P_k^{(\alpha, \beta)}$, $k \in \mathbb{N}_0$, definiert durch

$$(1.5.27) \quad P_k^{(\alpha, \beta)}(x) := \frac{(-1)^k}{2^k k!} (1-x)^{-\alpha} (1+x)^{-\beta} \frac{d^k}{dx^k} \{ (1-x)^{k+\alpha} (1+x)^{k+\beta} \},$$

bilden bezüglich $w(x) := (1-x)^\alpha (1+x)^\beta$, $\alpha, \beta > -1$, ein Orthogonalsystem. Speziell für $\alpha = \beta$ sind die Gegenbauer-Polynome $P_k^{(\alpha, \alpha)}$

$$(1.5.28) \quad P_k^{(\alpha, \alpha)}(x) = \frac{(-1)^k}{2^k k!} (1-x^2)^{-\alpha} \frac{d^k}{dx^k} (1-x^2)^{k+\alpha}$$

bezüglich $(1-x^2)^\alpha$, $\alpha > -1$, orthogonal. Bezeichnen wir mit p_k^α die orthonormalen Gegenbauer-Polynome, so besteht zwischen p_k^α und $P_k^{(\alpha, \alpha)}$ die Beziehung

$$(1.5.29) \quad p_k^\alpha(x) = \frac{1}{2^\alpha \Gamma(k+\alpha+1)} \left[\frac{2k+2\alpha+1}{2} k! \Gamma(k+2\alpha+1) \right]^{1/2} P_k^{(\alpha, \alpha)}(x)$$

(Szegő [57; Formel (4.3.1) und (4.3.4)]). Ferner gilt

$$(1.5.30) \quad P_k^{(\alpha, \alpha)}(x) = \frac{\Gamma(2\alpha+1) \Gamma(k+\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1) \Gamma(\alpha+\frac{1}{2}) \Gamma(k+2\alpha+1)} \sum_{j=0}^{k'} (-1)^j \frac{\Gamma(k-j+\alpha+\frac{1}{2})}{j! (k-2j)!} (2x)^{k-2j}$$

mit $k' := [k/2]$ (Szegő [57; Formel (4.7.1) und (4.7.31)]); für die Koeffizienten α_k, β_k der orthonormierten Polynome p_k^α (siehe (1.5.9)) gilt also

$$(1.5.31) \quad \alpha_k = \frac{1}{2^{k+\alpha} \Gamma(k+\alpha+1)} \left[\frac{2k+2\alpha+1}{2} k! \Gamma(k+2\alpha+1) \right]^{1/2} \binom{2k+2\alpha}{k}$$

und

$$(1.5.32) \quad \beta_k = - \frac{k+\alpha}{2^{k+\alpha} \Gamma(k+\alpha+1)} \left[\frac{2k+2\alpha+1}{2} k! \Gamma(k+2\alpha+1) \right]^{1/2} \binom{2k+2\alpha-2}{k-2}.$$

Dabei wurde $\Gamma(x)\Gamma(x+1/2) = \sqrt{\pi} \Gamma(2x)/2^{2x-1}$ verwendet. Aus (1.5.20), (1.5.31) und (1.5.32) folgt für $w(x) = (1-x^2)^\alpha$ (mit C_n^α statt C_n)

$$(1.5.33) \quad C_n^\alpha = \frac{(n+\alpha) \binom{2n+2\alpha-2}{n-2}}{\binom{2n+2\alpha}{n}} + \frac{(n+\alpha+2) \binom{2n+2\alpha+2}{n}}{\binom{2n+2\alpha+4}{n+2}}$$

und mit (1.5.25) bzw. (1.5.26)

$$(1.5.34) \quad \|R_n\| \leq \frac{2\tau\tau_n}{\sqrt{\tau^2-1}} \{ D_n^\alpha |1+2\tau^2(2C_n^\alpha-n-1)| + \frac{\tau^3}{\sqrt{\tau^2-1}} d_n^\alpha \}$$

bzw.

$$(1.5.35) \quad \|R_n\| \leq 2r\tau^{2n+1} [2D_n^\alpha |1 + \tau^2 (4C_n^\alpha - 2n-1)| + \tau \frac{(2n+5) - (2n+3)\tau^2}{2(r^2-1)} d_n^\alpha];$$

dabei seien

$$(1.5.36) \quad D_n^\alpha := \frac{2^{2n-1}}{\alpha_n^2} = \frac{2^{4n+2\alpha} [\Gamma(n+\alpha+1)]^2}{n! (2n+2\alpha+1) \Gamma(n+2\alpha+1) [(\frac{2n+2\alpha}{n})]^2}$$

und

$$(1.5.37) \quad d_n^\alpha := \|w\|_1 = 2^{2\alpha+1} [\Gamma(\alpha+1)]^2 / \Gamma(2\alpha+2).$$

(1.5.34) und (1.5.35) verbessern wir für $w(x)=1$ ($\alpha=0$), also für Gauß-Legendre-Formeln, dadurch, daß wir $R_n(T_{2j})$ und $R_n(U_{2j})$ für $j \geq n+2$ genauer als in (1.5.23) und (1.5.24) abschätzen. Dazu verwenden wir

$$(1.5.38) \quad \int_{-1}^1 T_{2j}(x) dx = -2/(4j^2-1) \quad \text{und} \quad \int_{-1}^1 U_{2j}(x) dx = 2/(2j+1)$$

(siehe S. 24) und erhalten

$$(1.5.39) \quad |R_n(T_{2j})| \leq 2 + \frac{2}{4j^2-1}, \quad |R_n(U_{2j})| \leq 2(2j+1) + \frac{2}{2j+1}.$$

Damit gilt

$$\sum_{j=n+2}^{\infty} \tau^{2j} |R_n(T_{2j})| \leq [2 + \frac{2}{4(n+2)^2-1}] \sum_{j=n+2}^{\infty} \tau^{2j} = \frac{4(n+2)^2}{4(n+2)^2-1} \cdot \frac{\tau^{2n+3}}{\sqrt{r^2-1}},$$

und mit (1.5.15), (1.5.17) und (1.5.21) folgt

$$(1.5.40) \quad \|R_n\| \leq \frac{2r\tau^{2n}}{\sqrt{r^2-1}} \{D_n^\alpha |1 - [1 + \frac{2n+1}{(2n-1)(2n+3)}] \tau^2| + \frac{4(n+2)^2}{4(n+2)^2-1} \frac{\tau^3}{\sqrt{r^2-1}}\}$$

$$=: \sigma_n^T(r)$$

$$\text{mit} \quad D_n^\alpha = \frac{2^{4n} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^2}.$$

Analog läßt sich (1.5.35) verbessern zu

$$\begin{aligned}
 (1.5.41) \quad ||R_n|| &\leq 2r\tau^{2n+1} \left\{ 2D_n^\circ \left[1 - \frac{\tau^{2n+1}}{(2n-1)(2n+3)} \tau^2 \right] \right. \\
 &\quad \left. + \left[2 + (2n+3) \frac{1}{2n+5} (1-\tau^2) \right] \frac{\tau^2}{2(r^2-1)} \right\} \\
 &=: \sigma_n^U(r) .
 \end{aligned}$$

Bemerkung: Schranken für $||R_n||$, die für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $||R_n||$ und für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch proportional $1/(r-1)$ sind, kann man auch direkt aus (1.1.5) gewinnen. Dies wollen wir für Gauß-Legendre-Formeln ausführen.

Die Gauß-Formel Q_n ist symmetrisch und hat Exaktheitsgrad $(2n-1)$, nach (1.1.5) gilt also

$$||R_n|| = \sum_{k=n}^{\infty} \frac{|R_n(q_{2k})|}{r^{2k}} .$$

Wir schätzen zunächst $R_n(q_{2j})$, $j \geq n+2$, ab. Aus (1.5.14) folgt $R_n(q_{2j}) \geq 0$, also

$$R_n(q_{2j}) \leq \int_{-1}^1 q_{2j}(x) dx = 2/(2j+1) ,$$

und damit

$$\sum_{k=n+2}^{\infty} \frac{|R_n(q_{2k})|}{r^{2k}} \leq \frac{2}{2n+5} \sum_{k=n+2}^{\infty} \frac{1}{r^{2k}} = \frac{2}{2n+5} \frac{1}{r^{2n+2}(r^2-1)} .$$

Verwendet man die exakten Werte von $R_n(q_{2n})$ und $R_n(q_{2n+2})$, so ergibt sich insgesamt

$$\begin{aligned}
 (1.5.42) \quad ||R_n|| &\leq \frac{D_n^\circ}{2^{2n-1}} \frac{1}{r^{2n}} \left[1 + \frac{(2n+1)(n^2+n-1)}{(2n-1)(2n+3)} \frac{1}{r^2} \right] \\
 &\quad + \frac{2}{2n+5} \frac{1}{r^{2n+2}(r^2-1)} =: \sigma_n^*(r)
 \end{aligned}$$

$$\text{mit } D_n^\circ = \frac{2^{4n} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^2} .$$

σ_n^* hat tatsächlich das oben geforderte asymptotische Verhalten, genauso wie σ_n^T und σ_n^U . σ_n^T und σ_n^U sind σ_n^* aber im folgenden Sinne überlegen:

Für $r \in (1, \infty)$ gilt

$$(1.5.43) \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sigma_n^*(r)}{\sigma_n^T(r)} = \infty \quad \text{und} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\sigma_n^*(r)}{\sigma_n^U(r)} = \infty ,$$

wie sich mit Hilfe der Stirlingschen Formel leicht zeigen läßt. Für den Vergleich dieser Schranken bei festem n in Abhängigkeit von r verweisen wir auf Abschnitt 1.8 .

Berechnung von $\|R_n\|$ für $\alpha = \pm 1/2$

Für $\alpha = \pm 1/2$ läßt sich $\|R_n\|$ aus (1.5.15) oder (1.5.16) berechnen. Für die entsprechenden Gauß-Formeln siehe z.B. Davis-Rabinowitz [20; S. 143 f].

Sei zunächst $\alpha = -1/2$. Nach Chawla [10] gilt

$$(1.5.44) \quad R_n(T_k) = \begin{cases} (-1)^{m+1} & \text{für } k=2nm, \quad m \in \mathbb{N} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

und für $k \geq 2n$

$$(1.5.45) \quad R_n(U_k) = \begin{cases} \pi(1+(-1)^{p+1}) & \text{für } k=2np+2m-2 \\ 0 & \text{für } k=2np+2m-1, \end{cases}$$

$m=1, \dots, n$ und $p \in \mathbb{N}$.

Aus (1.5.15) ergibt sich mit (1.5.44)

$$\|R_n\| = \frac{2\pi r}{\sqrt{r^2-1}} \left| \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} \tau^{2jn} \right| = \frac{2\pi r}{\sqrt{r^2-1}} \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^{j+1} \tau^{2jn} =$$

$$= \frac{2\pi r}{\sqrt{r^2-1}} \frac{\tau^{2n}}{1+\tau^{2n}},$$

also

$$(1.5.46) \quad ||R_n|| = \frac{2\pi r}{\sqrt{r^2-1}[(r+\sqrt{r^2-1})^{2n+1}]} , \quad w(x)=1/\sqrt{1-x^2} .$$

Dies folgt auch aus (1.5.16) und (1.5.45).

Für $\alpha = 1/2$ gilt ebenfalls nach Chawla [10] für $m \in \mathbb{N}$

$$(1.5.47) \quad R_n(U_k) = \begin{cases} \pi/2 & \text{für } k=(2n+2)m-2 \\ -\pi/2 & \text{für } k=(2n+2)m \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

und

$$(1.5.48) \quad R_n(T_k) = \begin{cases} \pi/4 & \text{für } k=(2n+2)m-2 \\ -\pi/2 & \text{für } k=(2n+2)m \\ \pi/4 & \text{für } k=(2n+2)m+2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

Mit (1.5.47) ergibt sich aus (1.5.16)

$$\begin{aligned} ||R_n|| &= \pi r \tau \left\{ \sum_{j=1}^{\infty} \tau^{(2n+2)j-2} - \sum_{j=1}^{\infty} \tau^{(2n+2)j} \right\} = \\ &= \pi r \tau (\tau^{-2}-1) \frac{\tau^{2n+2}}{1-\tau^{2n+2}}, \end{aligned}$$

also

$$(1.5.49) \quad ||R_n|| = \frac{2\pi r \sqrt{r^2-1}}{(r+\sqrt{r^2-1})^{2n+2-1}} , \quad w(x)=\sqrt{1-x^2} .$$

(1.5.49) folgt auch aus (1.5.15) und (1.5.48).

b. Quadraturformeln vom Lobatto-Typ

Eine Quadraturformel Q_n ist vom Lobatto-Typ, wenn sie Exaktheitsgrad $2n-3$ hat und die Randpunkte als Stützstel-

len benutzt. Die Bezeichnung ist in der Literatur nicht einheitlich. Solche Formeln heißen auch verallgemeinerte Lobatto- oder Bouzitat-Quadraturformeln (Engels [21; S. 324 ff]), Markoff-Quadraturformeln (Krylov [34; S. 166 ff]) und geschlossene Gauß-Formeln (Chawla [9]).

Wir betrachten hier zwei Spezialfälle, nämlich $w(x) := 1/\sqrt{1-x^2}$ (geschlossene Gauß-Tschebyscheff-Formeln) und $w(x) := 1$ (Lobatto-Formeln). Da w in beiden Fällen gerade ist, sind die Formeln symmetrisch.

Für $w(x) := 1/\sqrt{1-x^2}$ läßt sich $\|R_n\|$ aus (1.5.7) (oder (1.5.8)) berechnen. Nach Chawla [10] gilt nämlich

$$(1.5.50) \quad R_n(T_k) = \begin{cases} -\pi & \text{für } k=2(n-1)m \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

$m \in \mathbb{N}$, und

$$(1.5.51) \quad R_n(U_k) = \begin{cases} -2\pi p & \text{für } k=2(n-1)m+2p-2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases},$$

mit $p=1, \dots, n$ und $m \in \mathbb{N}$.

Aus (1.5.7) (mit $d'=n-1$) ergibt sich mit (1.5.50)

$$(1.5.52) \quad \|R_n\| = \frac{2\pi r}{\sqrt{r^2-1}[(r+\sqrt{r^2-1})^{2n-2}+1]}.$$

Die Stützstellen der Lobatto-Formel Q_n ($w(x)=1$) sind die Nullstellen von $P_n - P_{n-2}$. Hierbei ist P_k das k -te Legendre-Polynom. Für das Restfunktional R_n gilt: Zu $f \in C^{2n-2}[-1,1]$ gibt es $\xi \in (-1,1)$ mit

$$(1.5.53) \quad R_n(f) = - \frac{2^{2n-1} n! [(n-1)!]^4}{(n-1)(2n-1)[(2n-2)!]^3} f^{(2n-2)}(\xi)$$

(siehe etwa Braß [6; S. 96 und S. 149]). Für P_k gilt (Krylov [34; S. 23 ff])

$$P_k(x) = \frac{(2k)!}{2^k(k!)^2} x^k - \frac{(2k-2)!}{2^k(k-1)!(k-2)!} x^{k-2} + \pi_{k-4}(x)$$

mit Grad $\pi_{k-4} \leq k-4$. Es gilt also

$$P_n(x) - P_{n-2}(x) = \frac{(2n)!}{2^n(n!)^2} x^n - \frac{(2n-1)(2n-4)!}{2^{n-1}[(n-2)!]^2} x^{n-2} + \pi_{n-4}(x).$$

Multiplikation mit P_n liefert

$$\begin{aligned} [P_n(x) - P_{n-2}(x)] P_n(x) &= \frac{[(2n)!]^2}{2^{2n}(n!)^4} x^{2n} - \frac{(n-1)(2n-4)!(2n)!}{2^{2n-3}[(n-2)!]^2(n!)^2} x^{2n-2} \\ &\quad + \pi_{2n-4}(x). \end{aligned}$$

$$\text{Da } \int_{-1}^1 [P_n(x) - P_{n-2}(x)] P_n(x) dx = \int_{-1}^1 P_n^2(x) dx = \frac{2}{2n+1} \quad (\text{Krylov}$$

[34; S. 26]), $Q_n([P_n - P_{n-2}]P_n) = 0$ und $R_n(\pi_{2n-4}) = 0$ gilt, ergibt sich hieraus

$$R_n(q_{2n}) = \left[\frac{1}{2n+1} - \frac{2n-2}{2n-3} \right] \frac{2^{2n+1}(n!)^4}{[(2n)!]^2}.$$

Dabei wurde

$$R_n(q_{2n-2}) = - \frac{2^{2n-1}n[(n-1)!]^4}{(n-1)(2n-1)[(2n-2)!]^2}$$

verwendet, was aus (1.5.53) direkt folgt. Damit ergibt sich leicht

$$(1.5.54) \quad -R_n(T_{2n-2}) = \frac{n 2^{4n-4}[(n-1)!]^4}{(n-1)(2n-1)[(2n-2)!]^2} =: d_n,$$

$$(1.5.55) \quad R_n(T_{2n}) = \frac{2n(2n-5)}{(2n+1)(2n-3)} d_n$$

und

$$(1.5.56) \quad R_n(U_{2n-2}) = -2d_n,$$

$$(1.5.57) \quad R_n(U_{2n}) = -2 \frac{3(2n-1)}{(2n+1)(2n-3)} d_n$$

(wegen der Koeffizienten von T_j und U_j siehe S. 37).

Die Abschätzung (1.5.39) gilt auch in diesem Fall, da die Gewichtsfunktion 1 ist. Aus (1.5.7) folgt mit $d'=n-1$

$$\|R_n\| \leq \frac{2r}{\sqrt{r^2-1}} \{ \tau^{2n-2} |R_n(T_{2n-2}) + \tau^2 R_n(T_{2n})| + \sum_{j=n+1}^{\infty} \tau^{2j} |R_n(T_{2j})| \} ,$$

und mit (1.5.54), (1.5.55) und (1.5.39) ergibt sich

$$(1.5.58) \quad \|R_n\| \leq \frac{2r\tau^{2n-2}}{\sqrt{r^2-1}} \left\{ d_n \left(1 - \frac{2n(2n-5)}{(2n+1)(2n-3)} \tau^2 \right) + \frac{4(n+1)^2}{4(n+1)^2-1} \frac{\tau^3}{\sqrt{r^2-1}} \right\} .$$

Analog erhält man aus (1.5.8) mit (1.5.56), (1.5.57) und (1.5.39)

$$(1.5.59) \quad \|R_n\| \leq 2r\tau^{2n-1} \left\{ 2d_n \left(1 + \frac{3(2n-1)}{(2n+1)(2n-3)} \tau^2 \right) + \left[2 + (2n+1 + \frac{1}{2n+3}) (1-\tau^2) \right] \frac{\tau^2}{2(r^2-1)} \right\} .$$

Zusammenfassung der Resultate:

Es wurden exemplarisch Gauß-Formeln und Quadraturformeln vom Lobatto-Typ betrachtet. Ausgangspunkt war diesmal die Darstellung (1.2.2). Die Darstellung (1.2.4) bringt nämlich in diesem Fall keine Vorteile gegenüber (1.2.2) (die Resultate sind sogar identisch), ganz im Gegensatz zum vorigen

Paragraphen.

Durch Entwicklung der Funktion φ_1 nach Tschebyscheff-Polynomen erster und zweiter Art, Berechnung der ersten zwei (nichtverschwindenden) Terme in (1.5.5) und (1.5.6) und Abschätzung der restlichen Terme wurden Schranken für $\|R_n\|$ hergeleitet, die für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ und für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch proportional zu $1/(r-1)$ sind.

Für Gauß-Formeln zu den Gewichtsfunktionen $\sqrt{1-x^2}$ und $1/\sqrt{1-x^2}$ und für Formeln vom Lobatto-Typ zu $1/\sqrt{1-x^2}$ wurde $\|R_n\|$ als einfacher, geschlossener Ausdruck sogar berechnet.

1.6 Asymptotisches Verhalten von $\|R_n\|$ für $r \rightarrow 1+$ bei Gauß-Gegenbauer-Quadraturformeln

In den vorigen zwei Paragraphen leiteten wir unter recht allgemeinen Voraussetzungen Abschätzungen für $\|R_n\|$ her, die für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch proportional zu $1/(r-1)$ sind. In diesem Abschnitt untersuchen wir Gauß-Gegenbauer-Quadraturformeln, also Gauß-Formeln zu $w(x) := (1-x^2)^\alpha$, $\alpha > -1$. Wir gehen von der Darstellung (1.2.7) aus und geben mit Hilfe der Jacobi-Funktionen 2. Art das asymptotische Verhalten von $\|R_n\|$ für $r \rightarrow 1+$ an.

Für $\alpha \geq 0$ leiten wir auch Abschätzungen her, die für $r \rightarrow 1+$ das asymptotische Verhalten von $\|R_n\|$ wiedergeben.

Für $\alpha = \pm 1/2$ erhalten wir nochmals (1.5.46) und (1.5.49) auf andere Weise.

Die Jacobi-Polynome $P_k^{(\alpha, \alpha)}$, $k \in \mathbb{N}_0$,

$$(1.6.1) \quad P_k^{(\alpha, \alpha)}(x) = \frac{(-1)^k}{2^k k!} (1-x^2)^{-\alpha} \frac{d^k}{dx^k} (1-x^2)^{k+\alpha},$$

die in (1.5.27) definiert wurden, bilden ein Orthogonalsystem bezüglich $w(x) := (1-x^2)^\alpha$ und sind normiert durch

$$(1.6.2) \quad P_k^{(\alpha, \alpha)}(1) = \binom{k+\alpha}{k}, \quad k \in \mathbb{N}_0.$$

Die Stützstellen der Gauß-Formel Q_n zu $(1-x^2)^\alpha$ sind die Nullstellen von $P_n^{(\alpha, \alpha)}$. In diesem Fall schreibt sich (1.2.7) also als

$$(1.6.3) \quad \|R_n\| = \frac{r}{P_n^{(\alpha, \alpha)}(r)} \int_{-1}^1 (1-x^2)^\alpha \frac{P_n^{(\alpha, \alpha)}(x)}{r-x} dx.$$

Auf den Betrag kann hier verzichtet werden, da nach (1.5.12) $R_n(\varphi_1)$ positiv ist (siehe auch die Herleitung von (1.2.7)). Mit der Jacobi-Funktion 2. Art

$$(1.6.4) \quad Q_n^{(\alpha, \alpha)}(r) := \frac{1}{2} (r^2 - 1)^{-\alpha} \int_{-1}^1 (1-x^2)^\alpha \frac{P_n^{(\alpha, \alpha)}(x)}{r-x} dx$$

(Szegő [57; S. 73 ff]) läßt sich (1.6.3) schreiben als

$$(1.6.5) \quad \|R_n\| = 2r(r^2-1)^\alpha Q_n^{(\alpha, \alpha)}(r) / P_n^{(\alpha, \alpha)}(r) .$$

Das asymptotische Verhalten von $Q_n^{(\alpha, \alpha)}$ für $r \rightarrow 1+$ ist bekannt. Es gilt nämlich (Szegő [57; S. 77, Thm. 4.62.1]) für $r \rightarrow 1+$

$$(1.6.6) \quad Q_n^{(\alpha, \alpha)}(r) \begin{cases} \approx [\ln(r-1)]^{-1}/2 & , \text{ für } \alpha=0 \\ \approx 2^{\alpha-1} \frac{\Gamma(\alpha)\Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(n+2\alpha+1)} (r-1)^{-\alpha} & , \text{ für } \alpha>0 \\ \sim 1 & , \text{ für } \alpha<0 . \end{cases}$$

Aus (1.6.2), (1.6.5) und (1.6.6) folgt jetzt sofort

$$(1.6.7) \quad \|R_n\| \begin{cases} \approx \ln(r-1)^{-1} & , \text{ für } \alpha=0 \\ \approx 2^{2\alpha} \alpha \frac{[\Gamma(\alpha)]^2 n!}{\Gamma(n+2\alpha+1)} & , \text{ für } \alpha>0 \\ \sim (r-1)^\alpha & , \text{ für } \alpha<0 \end{cases}$$

für $r \rightarrow 1+$.

Bemerkungen:

1. Für $\alpha = 0$ wurde (1.6.7) schon in (1.3.6) bewiesen.
2. Sei

$$\tilde{X}_1 := \{ f : f \text{ holomorph für } |z| < 1 \text{ und } |f|_1 < \infty \} .$$

Dabei ist für $f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} \alpha_k z^k$, $|f|_1$ definiert durch

$$|f|_1 := \sup_{R_n(q_k) \neq 0} |\alpha_k|$$

(vergleiche die entsprechenden Definitionen im Abschnitt 1.1; hier ist $\rho = 1$ im Gegensatz zu früher).

Das Resultat (1.6.7) zeigt, daß das Fehlerfunktional der Gauß-Formel zur Gewichtsfunktion $w(x) := (1-x^2)^\alpha$ für $\alpha > 0$ auf $(\tilde{X}_1, |\cdot|_1)$ stetig ist.

Abschätzung von $\|R_n\|$ für $\alpha > 0$

Für $\alpha > 0$ leiten wir jetzt eine Abschätzung her, die sowohl für $r \rightarrow \infty$ als auch für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ ist.

(1.5.2) entnimmt man $R_n(q_{2j}) \geq 0$, $j \in \mathbb{N}_0$. Wegen der Symmetrie der Quadraturformel gilt $R_n(q_{2j+1}) = 0$, $j \in \mathbb{N}_0$, und aus (1.1.5) ergibt sich

$$\|R_n\| = \sum_{j=n}^{\infty} \frac{R_n(q_{2j})}{r^{2j}}.$$

Aus (1.6.7) folgt

$$\sum_{j=n}^{\infty} R_n(q_{2j}) = 2^{2\alpha} \alpha [\Gamma(\alpha)]^2 n! / \Gamma(n+2\alpha+1) \quad (r=1, \alpha > 0),$$

und mit

$$\begin{aligned} \|R_n\| &= \frac{R_n(q_{2n})}{r^{2n}} \left(1 - \frac{1}{r^2}\right) + \frac{R_n(q_{2n})}{r^{2n+2}} + \sum_{j=n+1}^{\infty} \frac{R_n(q_{2j})}{r^{2j}} \\ &\leq \frac{R_n(q_{2n})}{r^{2n}} \left(1 - \frac{1}{r^2}\right) + \frac{1}{r^{2n+2}} \sum_{j=n}^{\infty} R_n(q_{2j}) \end{aligned}$$

ergibt sich

$$(1.6.8) \quad \|R_n\| \leq \frac{R_n(q_{2n})}{r^{2n}} \left(1 - \frac{1}{r^2}\right) + \frac{1}{r^{2n+2}} \frac{2^{2\alpha} \alpha [\Gamma(\alpha)]^2 n!}{\Gamma(n+2\alpha+1)}.$$

Der Wert von $R_n(q_{2n})$ folgt sofort aus (1.5.13). Diese Abschätzung läßt sich auf einfache Weise verbessern, z.B. dadurch, daß man auch den Wert von $R_n(q_{2n+2})$ verwendet,

der im Paragraphen 1.5. berechnet wurde.

Abschätzung von $\|R_n\|$ für $\alpha = 0$

Für $\alpha = 0$, also für Gauß-Legendre-Formeln, leiten wir jetzt eine Abschätzung her, die für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$, d.h. asymptotisch gleich $\ln(r-1)^{-1}$ ist.

Wir gehen von (1.6.5) aus, also von

$$(1.6.9) \quad \|R_n\| = 2r Q_n(r)/P_n(r)$$

mit $Q_n := Q_n^{(0,0)}$ und $P_n = P_n^{(0,0)}$, und schätzen die Legendre-Funktion 2. Art Q_n nach oben und das Legendre-Polynom P_n nach unten ab. Für Q_n gilt (Copson [14; S. 290 f])

$$Q_n(r) = \int_0^a \psi(\theta) d\theta, \quad \psi(\theta) := (r - \sqrt{r^2 - 1} \cosh \theta)^n,$$

mit $a := \frac{1}{2} \ln \frac{r+1}{r-1}$, $r > 1$. Da ψ in $[0, a]$ fallend ist, kann man das Integral mit Hilfe der linken Rechteckregel nach oben abschätzen. Je kleiner die Schnittweite h gewählt wird, desto besser wird $Q_n(r)$ abgeschätzt. Wir wählen $h := a/2$, um eine einfache Schranke zu erhalten. Es gilt also

$$(1.6.10) \quad Q_n(r) \leq \frac{1}{4} \ln \frac{r+1}{r-1} \left\{ r^n + \left[r - \frac{4\sqrt{r^2-1}}{2} (\sqrt{r+1} + \sqrt{r-1}) \right]^n \right\}.$$

Nun schätzen wir $P_n(r)$ ab. Aus

$$(1.6.11) \quad P_k^{(\alpha, \beta)}(x) = \sum_{j=0}^k \binom{k+\alpha}{k-j} \binom{k+\beta}{j} \left(\frac{x-1}{2}\right)^j \left(\frac{x+1}{2}\right)^{k-j}, \quad k \in \mathbb{N}_0,$$

(Szegő [57; S. 67]) folgt sofort

$$(1.6.12) \quad P_k^{(0, \beta)}(x) \geq \left(\frac{x+1}{2}\right)^k, \quad x \geq 1.$$

Ferner gilt (Szegő [57; S. 58])

$$(1.6.13) \quad P_{2k}(x) = P_k^{(0, -\frac{1}{2})}(2x^2-1) \quad , \quad P_{2k+1}(x) = x P_k^{(0, \frac{1}{2})}(2x^2-1) \quad ;$$

damit ergibt sich aus (1.6.12)

$$(1.6.14) \quad P_n(r) \geq r^n \quad .$$

Nach (1.6.9), (1.6.10) und (1.6.14) gilt also

$$(1.6.15) \quad \|R_n\| \leq \frac{1}{2r^{n-1}} \ln \frac{r+1}{r-1} \{ \tau^n + [r - \frac{4\sqrt{r^2-1}}{2} (\sqrt{r+1} + \sqrt{r-1})]^n \}$$

$$=: \sigma_n^L(r) \quad .$$

σ_n^L ist für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$. Numerische Beispiele dazu werden im Abschnitt 1.8 angegeben.

Berechnung von $\|R_n\|$ für $\alpha = \pm 1/2$

Für $\alpha = \pm 1/2$ läßt sich $\|R_n\|$ direkt aus (1.6.3) berechnen. Dies führen wir im folgenden aus.

Sei zunächst $\alpha = -1/2$, also $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$. Die Stützstellen der zugehörigen Gauß-Formel Q_n sind die Nullstellen des Tschebyscheff-Polynoms erster Art T_n (Davis-Rabinowitz [20; S. 143]). Nach (1.6.3) gilt also

$$(P_n^{(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})})_{\ell_n} = T_n \quad , \quad \ell_n > 0$$

$$(1.6.16) \quad \|R_n\| = \frac{r}{T_n(r)} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{T_n(x)}{r-x} dx \quad .$$

Das Integral auf der rechten Seite läßt sich elementar berechnen:

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{T_n(x)}{r-x} dx = \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \frac{\cos(n \arccos x)}{r-x} dx =$$

$$= \int_0^{\pi} \frac{\cos(ny)}{r - \cos y} dy = \frac{\pi (r - \sqrt{r^2 - 1})^n}{\sqrt{r^2 - 1}}.$$

Die erste Gleichheit gilt wegen $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$ für $x \in [-1, 1]$, die zweite folgt durch Variablensubstitution und zur dritten siehe Gröbner-Hofreiter [22; S. 112].
Wegen

$$(1.6.17) \quad T_n(r) = \frac{1}{2} [(r + \sqrt{r^2 - 1})^n + (r - \sqrt{r^2 - 1})^n]$$

(Rivlin [50; S. 5]) ergibt sich aus (1.6.16)

$$(1.6.18) \quad \|R_n\| = \frac{2\pi r}{\sqrt{r^2 - 1} [(r + \sqrt{r^2 - 1})^{2n+1}]} , \quad w(x) = 1/\sqrt{1-x^2},$$

also das Resultat in (1.5.46).

Die Stützstellen der Gauß-Formel Q_n zur Gewichtsfunktion $w(x) := 1/\sqrt{1-x^2}$ - also $\alpha=1/2$ - sind die Nullstellen des Tschebyscheff-Polynoms 2. Art U_n (Davis-Rabinowitz [20; S. 143]). Nach (1.6.3) gilt also

$$(P_n^{(1/2, 1/2)})'_n = \ell'_n U_n, \quad \ell'_n > 0$$

$$(1.6.19) \quad \|R_n\| = \frac{r}{U_n(r)} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} \frac{U_n(x)}{r-x} dx.$$

Da $U_n(x) = \sin[(n+1)\arccos x]/\sqrt{1-x^2}$ ist, gilt für das Integral auf der rechten Seite

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} \frac{U_n(x)}{r-x} dx &= \int_{-1}^1 \frac{\sin[(n+1)\arccos x]}{r-x} dx \\ &= \int_0^{\pi} \frac{\sin[(n+1)y] \sin y}{r - \cos y} dy = \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \int_0^{\pi} \frac{\cos(ny)}{r - \cos y} dy - \int_0^{\pi} \frac{\cos[(n+2)y]}{r - \cos y} dy \right\} \end{aligned}$$

$$= \frac{\pi}{2\sqrt{r^2-1}} \{ (r-\sqrt{r^2-1})^n - (r+\sqrt{r^2-1})^{n+2} \} = \pi (r-\sqrt{r^2-1})^{n+1} ,$$

und mit

$$(1.6.20) \quad U_n(r) = \frac{1}{2\sqrt{r^2-1}} \{ (r+\sqrt{r^2-1})^{n+1} - (r-\sqrt{r^2-1})^{n+1} \}$$

ergibt sich aus (1.6.19)

$$(1.6.21) \quad \|R_n\| = \frac{2\pi r\sqrt{r^2-1}}{(r+\sqrt{r^2-1})^{2n+2-1}} , \quad w(x) = \sqrt{1-x^2} ,$$

also das Ergebnis in (1.5.49).

Bemerkung: Auch für geschlossene Gauß-Tschebyscheff-Formeln läßt sich $\|R_n\|$ direkt aus (1.2.7) berechnen. Das Fehlerfunktional der geschlossenen Gauß-Tschebyscheff-Formel Q_n ,

$$Q_n(f) = w_1 f(-1) + \sum_{k=2}^{n-1} w_k f(x_k) + w_n f(1) ,$$

verschwindet auf $\mathbb{P}_{2n-3}$. Die Gewichtsfunktion ist $w(x) = 1/\sqrt{1-x^2}$. Das Polynom $(x-x_2)\dots(x-x_{n-1})$ steht senkrecht zu allen Polynomen von Grad $\leq n-3$ bezüglich $w^*(x) := (1-x^2)^2 w(x) = \sqrt{1-x^2}$ (Krylov [34; S. 170 ff]). Da bekanntlich die Tschebyscheff-Polynome 2. Art bezüglich w^* orthogonal sind, sind die Knoten $x_2, \dots, x_{n-1}$ Nullstellen von U_{n-2} . Nach (1.2.7) gilt also

$$\|R_n\| = r \left| \frac{1}{(1-r^2)U_{n-2}(r)} \int_{-1}^1 \sqrt{1-x^2} \frac{U_{n-2}(x)}{r-x} dx \right| ,$$

und eine leichte Rechnung (siehe (1.6.19) - (1.6.20)) liefert das Resultat von (1.5.52).

Zusammenfassung der Resultate:

Ausgangspunkt dieses Abschnittes war die Darstellung (1.2.7). Mit Hilfe der Jacobi-Funktionen 2. Art wurde das richtige asymptotische Verhalten von $||R_n||$ für $r \rightarrow 1+$ bei Gauß-Gegenbauer-Formeln angegeben.

Für $\alpha \geq 0$ wurden Abschätzungen für $||R_n||$ hergeleitet, die für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch gleich $||R_n||$ sind, und für $\alpha = \pm 1/2$ wurde $||R_n||$ auf andere Weise als im Paragraphen 1.5 berechnet.

1.7 Offenes und geschlossenes Clenshaw-Curtis-Verfahren und nichtsymmetrische Quadraturformeln

In diesem Abschnitt leiten wir Abschätzungen für das offene Clenshaw-Curtis-Verfahren (Filippi-Verfahren) und für Radau-Formeln und Gauß-Formeln zur Gewichtsfunktion $1+x$ her.

Darüber hinaus zeigen wir, daß die (geschlossenen) Clenshaw-Curtis-Formeln Q_n für $n \geq 4$ nichtdefinit sind. Damit wird die bislang ungeklärte Frage nach der Definitheit oder Nichtdefinitheit dieser Formeln beantwortet, denn für $n \leq 3$ läßt sich die Definitheit von Q_n leicht verifizieren.

Filippi-Verfahren

Für das Fehlerfunktional R_n der Filippi-Quadraturformel Q_n gilt nach Locher [38] bzw. Braß-Schmeißer [7]

$$\forall f \in C^{n+1}[-1,1] \quad \exists \xi \in (-1,1) \quad R_n(f) = \frac{1}{2^{n-1} n! n(n+2)} f^{(n+1)}(\xi)$$

für n ungerade bzw.

$$\forall f \in C^n[-1,1] \quad \exists \xi \in (-1,1) \quad R_n(f) = \frac{1}{2^{n-1} (n+1)!} f^{(n)}(\xi)$$

für n gerade.

Aus diesen Darstellungen folgt insbesondere $R_n(q_{2k}) \geq 0$, $k \in \mathbb{N}_0$. Da wegen der Symmetrie der Quadraturformeln $R_n(q_{2k+1}) = 0$ ($k \in \mathbb{N}_0$) gilt, ist die Bedingung (1.2.1) erfüllt. Die Filippi-Formeln sind interpolatorisch, und die Knoten von Q_n sind die Nullstellen des Tschebyscheff-Polynoms 2. Art U_n (siehe etwa Braß [6; S. 116]). Nach (1.2.7) gilt also

$$(1.7.1) \quad \|R_n\| = \frac{r}{U_n(r)} \int_{-1}^1 \frac{U_n(x)}{r-x} dx$$

(die rechte Seite ist positiv, da $R_n(\varphi_1) > 0$ gilt). Nach einer einfachen Integraltransformation schreibt sich (1.7.1) als

$$(1.7.2) \quad ||R_n|| = \frac{r}{U_n(r)} \int_0^\pi \frac{\sin[(n+1)x]}{r - \cos x} dx.$$

Das Integral auf der rechten Seite läßt sich elementar berechnen (Gröbner-Hofreiter [22; S. 112]). Der dadurch erhaltene Ausdruck ist aber nur für sehr kleines n einfach. Aus diesem Grund schätzen wir für $n \geq 6$ das Integral durch einen einfachen Ausdruck ab. Wir gehen dabei von (1.7.1) aus und verwenden (1.5.1).

Wie man mit Hilfe von (1.6.17) und (1.6.20) nachrechnet, gilt für $j \equiv n \pmod{2}$

$$U_n(x) T_j(x) = \begin{cases} [U_{n+j}(x) + U_{n-j}(x)]/2 & \text{für } n \geq j \\ [U_{n+j}(x) + U_{j-2-n}(x)]/2 & \text{für } n < j; \end{cases}$$

daraus ergibt sich mit (1.5.38)

$$(1.7.3) \quad \int_{-1}^1 U_n(x) T_j(x) dx = \frac{2(n+1)}{(n+1)^2 - j^2}, \quad j \equiv n \pmod{2}.$$

Für $j \not\equiv n \pmod{2}$ verschwindet das Integral, da die Funktion $U_n T_j$ ungerade ist. Insgesamt ergibt sich also

$$\int_{-1}^1 \frac{U_n(x)}{r-x} dx = \frac{4(n+1)}{\sqrt{r^2-1}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\tau^{2j}}{(n+1)^2 - (2j)^2} \quad \text{für } n \text{ gerade,}$$

$$\int_{-1}^1 \frac{U_n(x)}{r-x} dx = \frac{4(n+1)}{\sqrt{r^2-1}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\tau^{2j+1}}{(n+1)^2 - (2j+1)^2} \quad \text{für } n \text{ ungerade}$$

mit $\tau = r - \sqrt{r^2 - 1}$. Nun schätzen wir ab. Für $n = 2n'$ gilt

$$(1.7.4) \quad \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\tau^{2j}}{(n+1)^2 - (2j)^2} \leq \sum_{j=0}^{n'} \frac{\tau^{2j}}{(n+1)^2 - (2j)^2}$$

$$\leq \frac{1}{2(n+1)^2} + \frac{\tau^2}{n^2+2n-3} + \frac{\tau^4}{n^2+2n-8} + \frac{1}{2n+1} \sum_{j=3}^{n'} \tau^{2j}$$

$$= \frac{1}{2(n+1)^2} + \frac{\tau^2}{n^2+2n-3} + \frac{\tau^4}{n^2+2n-8} + \frac{1}{2n+1} \frac{\tau^{6-\tau^n}}{1-\tau^2},$$

und mit (1.6.20) folgt aus (1.7.1) für gerades n

$$(1.7.5) \quad \|R_n\| \leq \frac{8(n+1)r\tau^{n+1}}{1-\tau^{2n+2}} \left\{ \frac{1}{2(n+1)^2} + \frac{\tau^2}{n^2+2n-3} + \frac{\tau^4}{n^2+2n-8} + \frac{1}{2n+1} \frac{\tau^{6-\tau^n}}{1-\tau^2} \right\}.$$

Diese Schranke ist für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$. Für $r \rightarrow 1+$ ist sie aber asymptotisch proportional zu $1/\sqrt{r-1}$, während $\|R_n\| \approx \ln(r-1)^{-1}$ für $r \rightarrow 1+$ gilt. Dies liegt natürlich an der Abschätzung (1.7.4). Man beachte, daß

$$\sum_{j=0}^{\infty} \frac{1}{(n+1)^2 - (2j)^2} = \frac{1}{2(n+1)^2} \left\{ 1 + 2 \left(\frac{n+1}{2} \right)^2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{\left(\frac{n+1}{2} \right)^2 - j^2} \right\}$$

$$= \frac{\pi}{n+1} \operatorname{ctg} \frac{(n+1)\pi}{2} = 0$$

gilt. Zur Partialbruchzerlegung der Funktion ctg ,

$$\pi x \operatorname{ctg}(\pi x) = 1 + 2x^2 \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{x^2 - j^2} \quad \text{für } x \in \mathbb{R} \setminus \{0, \pm 1, \pm 2, \dots\},$$

siehe z.B. Knopp [32; S. 209 ff, Formel 117].

Für ungerades n erhält man analog die Abschätzung

$$(1.7.6) \quad \|R_n\| \leq \frac{8(n+1)r\tau^{n+2}}{1-\tau^{2n+2}} \left\{ \frac{1}{2n(n+2)} + \frac{\tau^2}{n^2+2n-8} + \frac{\tau^4}{n^2+2n-24} + \frac{1}{2n+1} \frac{\tau^{6-\tau^{n-1}}}{1-\tau^2} \right\}.$$

Bemerkung: Geht man von (1.7.2) aus, so erhält man mit Hilfe der Fourier-Entwicklung von $1/(r-\cos x)$ auch die Abschätzungen (1.7.5) und (1.7.6).

Die Nichtdefinitheit der Clenshaw-Curtis-Formeln für $n \geq 4$

Für $n=2$ bzw. $n=3$ fällt die Clenshaw-Curtis-Quadraturformel Q_n mit der elementaren Sehnentrapez- bzw. Simpsonregel zusammen. Für $n \leq 3$ ist Q_n also definit. Für $n=5$ zeigt Locher [38] durch Berechnung des zugehörigen Peano-Kerns, daß Nichtdefinitheit vorliegt.

Wir zeigen im folgenden, daß Q_n für $n \geq 4$ nichtdefinit ist. Die Bedingung (1.2.1), also

$$(1.7.7) \quad \exists \quad \forall \quad \epsilon R_n(q_{2k}) \geq 0 \\ \epsilon \in \{-1, 1\} \quad k \in \mathbb{N}_0.$$

($R_n(q_{2k+1}) = 0$ wegen der Symmetrie), ist nämlich nicht erfüllt, wie im folgenden gezeigt wird; daraus folgt natürlich sofort die Nichtdefinitheit.

Die Stützstellen der Clenshaw-Curtis-Formel Q_n sind die Randpunkte ± 1 und die Nullstellen von U_{n-2} ; die Gewichte sind positiv, siehe etwa Braß [6 ; S. 117 und S. 136 ff]. Sei

$$Q_n(f) = w_1 f(-1) + \sum_{j=2}^{n-1} w_j f(x_j) + w_n f(1),$$

und n sei gerade ; dann gilt $w_1 = w_n = 1/(n-1)^2$ (Braß [6 ; S. 139]). Also gilt

$$R_n(q_{2k}) = \int_{-1}^1 x^{2k} dx - \frac{2}{(n-1)^2} - \sum_{j=2}^{n-1} w_j x_j^{2k} \\ < \int_{-1}^1 x^{2k} dx - \frac{2}{(n-1)^2} = 2 \left[\frac{1}{2k+1} - \frac{1}{(n-1)^2} \right].$$

Daraus ergibt sich $R_n(q_{2k}) < 0$ für $k \geq n(n-2)/2$. Für

$p_n(x) := (x^2-1)U_{n-2}(x)$ gilt $Q_n(p_n) = 0$ und damit

$$\begin{aligned} R_n(p_n) &= \int_{-1}^1 (x^2-1)U_{n-2}(x)dx = \frac{1}{n-1} \int_{-1}^1 (x^2-1)T_{n-1}(x)dx \\ &= -\frac{2}{n-1} \int_{-1}^1 x T_{n-1}(x)dx = -\frac{2}{n-1} \int_{-1}^1 T_1(x)T_{n-1}(x)dx. \end{aligned}$$

Mit $T_j T_k = (T_{j+k} + T_{|j-k|})/2$ (Rivlin [50; S. 5]) und (1.5.38) erhält man daraus

$$R_n(p_n) = \frac{2}{n-1} \left[\frac{1}{n^2-1} + \frac{1}{(n-2)^2-1} \right],$$

für $n \geq 4$ also $R_n(p_n) > 0$. Da der Höchstkoeffizient von U_{n-2} positiv ist und Q_n Polynome vom Höchstgrad $n-1$ exakt integriert, ergibt sich daraus $R_n(q_n) > 0$; andererseits gilt $R_n(q_{2k}) < 0$ für $k \geq n(n-2)/2$. Die Bedingung (1.7.7) ist also nicht erfüllt, und Q_n ist somit für $n \geq 4$ nichtdefinit.

Für ungerades n gilt $w_1 = w_n = 1/(n^2-2n)$ (Braß [6; S. 139]) und damit

$$R_n(q_{2k}) < \int_{-1}^1 x^{2k} dx - \frac{2}{n^2-2n} = 2 \left[\frac{1}{2k+1} - \frac{1}{n^2-2n} \right];$$

daraus folgt $R_n(q_{2k}) < 0$ für $k \geq (n^2-2n-1)/2$. Andererseits gilt mit $p_{n+1}(x) := x(x^2-1)U_{n-2}(x)$

$$R_n(p_{n+1}) = \frac{1}{n+1} \left[\frac{3}{2n(n+2)} + \frac{3}{2(n^2-6n+8)} + \frac{1}{n(n-2)} \right],$$

für $n \geq 5$ also $R_n(p_{n+1}) > 0$, d.h. Q_n ist für $n \geq 5$ nichtdefinit.

Wir haben bis jetzt Abschätzungen für $\|R_n\|$ unter der Voraussetzung (1.2.1) hergeleitet. Wie wir gesehen haben, ist diese Bedingung für die (geschlossenen) Clenshaw-Curtis-Formeln nicht erfüllt.

Für konstante Gewichtsfunktion leiten wir im folgenden Abschätzungen für symmetrische Quadraturformeln ohne die Voraussetzung (1.2.1) her. Dazu machen wir Gebrauch von folgendem

Lemma 3 (Braß-Schmeißer [8])

Die Gewichte einer Quadraturformel Q_n , die Polynome bis zum Grad $2m-3$ exakt integriert, seien positiv und ihre Stützstellen liegen in $[-1,1]$. Die Gewichtsfunktion sei konstant, $w(x)=1$. Sei R_n das Fehlerfunktional von Q_n und R_m^L das Fehlerfunktional der Lobatto-Formel mit m Knoten. Ist $f \in C^{2m-2}[-1,1]$ und $f^{(2m-2)}(x) \geq 0$ für $x \in [-1,1]$, so gilt

$$(1.7.8) \quad |R_n(f)| \leq |R_m^L(f)|.$$

* * *

Sei R_n das Fehlerfunktional einer symmetrischen Quadraturformel Q_n , die den Voraussetzungen von Lemma 3 genügt. Q_n habe Exaktheitsgrad $d=2m-3$. Dann gilt (siehe (1.1.5))

$$\begin{aligned} \|R_n\| &= \sum_{k=m-1}^{\infty} \frac{|R_n(q_{2k})|}{r^{2k}} \leq \frac{|R_n(q_{2m-2})|}{r^{2m-2}} + \sum_{k=m}^{\infty} \frac{|R_m^L(q_{2k})|}{r^{2k}} \\ &= \frac{|R_m(q_{2m-2})| - |R_m^L(q_{2m-2})|}{r^{2m-2}} + \sum_{k=m-1}^{\infty} \frac{|R_m^L(q_{2k})|}{r^{2k}}, \end{aligned}$$

also

$$(1.7.9) \quad \|R_n\| \leq \|R_m^L\| + \{|R_m(q_{2m-2})| - |R_m^L(q_{2m-2})|\} / r^{2m-2}.$$

Für $\|R_m^L\|$ wurden aber schon Abschätzungen in (1.4.35), (1.5.58) und (1.5.59) angegeben. Aus (1.7.9) ergeben sich damit Abschätzungen für andere Quadraturformeln, für die die Voraussetzungen von Lemma 3 erfüllt sind, z.B. für die

Clenshaw-Curtis-Formeln. Schätzt man in (1.7.9) $\|R_m^L\|$ durch eine Schranke ab, die für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_m^L\|$ ist, etwa mit Hilfe von (1.5.58) oder (1.5.59), so erhält man eine Abschätzung für $\|R_n\|$, die für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ ist.

Unsymmetrische Quadraturformeln

Wir wenden uns jetzt unsymmetrischen Formeln zu, nämlich den Radau-Formeln und den Gauß-Formeln zur Gewichtsfunktion $w(x) := 1+x$.

Zunächst untersuchen wir die Radau-Formeln. Die Radau-Formeln mit n Knoten haben Exaktheitsgrad $2n-2$ und entweder -1 oder $+1$ als Stützstelle. Die Gewichtsfunktion ist konstant ($w(x)=1$).

Für jede in $[-1,1]$ $(2n-1)$ -mal stetig differenzierbare Funktion f gibt es ein $\xi \in (-1,1)$, so daß

$$(1.7.10) \quad R_n(f) = \pm \frac{2^{2n-1} n! (n-1)!^4}{[(2n-1)!]^3} f^{(2n-1)}(\xi)$$

gilt. Das Vorzeichen ist dabei $+$ oder $-$ je nachdem, ob -1 oder $+1$ Stützstelle ist. Hierzu siehe etwa Davis-Rabinowitz [20; S. 79 f]. Da die Radau-Formeln mit derselben Knotenzahl und -1 bzw. $+1$ als Stützstelle symmetrisch zueinander bezüglich 0 sind, liefern sie denselben Fehler bei der Integration einer geraden und entgegengesetzte Fehler bei der Integration einer ungeraden Funktion. Damit folgt aus (1.1.5), daß die Fehlerfunktionale beider Formeln dieselbe Norm haben. Die Norm des Fehlerfunktionals ist also unabhängig davon, ob -1 oder $+1$ als Stützstelle verwendet wird. Wir betrachten deswegen nur den Fall mit $+1$ als Stützstelle. Nach (1.7.10) gilt in diesem Fall

$$(1.7.11) \quad R_n(q_{2k+1}) \leq 0, \quad k \in \mathbb{N}_0,$$

mit $q_i(x) := x^i$, $i \in \mathbb{N}_0$. Ferner gilt (Braß [6; S. 151 ff])

$$R_n(q_{2k}) = \int_{-1}^1 x^{2k} dx - \sum_{i=1}^n w_i x_i^{2k} = \frac{2}{2k+1} - \frac{2}{n^2} - \sum_{i=1}^{n-1} w_i x_i^{2k}$$

$$< \frac{2}{2k+1} - \frac{2}{n^2}$$

und damit

$$(1.7.12) \quad R_n(q_{2k}) < 0, \quad k \geq (n^2-1)/2.$$

Für $3 \leq n \leq 31$ gilt

$$(1.7.13) \quad R_n(q_{2k}) < 0, \quad n < k < (n^2-1)/2;$$

dies haben wir numerisch verifiziert. Stützstellen und Gewichte wurden Stroud-Secrest [56; S. 174 ff und S. 340 ff] entnommen.¹⁾ Man beachte, daß zwischen den Stützstellen x_i und Gewichten w_i der Radau-Formel Q_n mit 1 als Stützstelle und den Stützstellen x_i^* und w_i^* der Gauß-Formel Q_{n-1}^* zu $w(x) = 1-x$ folgende Beziehungen gelten: $w_i = w_i^*/(1-x_i)$ und $x_i = x_i^*$, $i=1, \dots, n-1$. Ferner sind die Gauß-Formeln zu den Gewichtsfunktionen $1+x$ bzw. $1-x$ mit derselben Knotenzahl zueinander symmetrisch bezüglich 0.

Da auch $R_n(q_{2n}) < 0$ (siehe (1.7.22)) gilt, ergibt sich insgesamt

$$(1.7.14) \quad \forall_{3 \leq n \leq 31} \quad \forall_{k \in \mathbb{N}_0} \quad R_n(q_k) \leq 0,$$

d.h. die Bedingung (1.2.1) ist erfüllt, und nach (1.2.2) gilt

$$(1.7.15) \quad \forall_{3 \leq n \leq 31} \quad \|R_n\| = r |R_n(\varphi_1)|, \quad \varphi_1(x) = 1/(r-x).$$

1) Sämtliche Rechnungen wurden in FORTRAN IV an der Rechanlage CYBER 175 (CDC) des Leibniz-Rechenzentrums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften durchgeführt. Die Rechnungen dieses Abschnitts erfolgten mit doppelter Genauigkeit.

Aus (1.4.22) folgt also für $3 \leq n \leq 31$

$$(1.7.16) \quad ||R_n|| \leq 2r [1 + \tau^2/(2n-3)] \tau^{2n-2}/(r^2-1) .$$

Mit $d=2n-2$ schreibt sich (1.5.5) in diesem Fall als

$$(1.7.17) \quad ||R_n|| = \frac{2r}{\sqrt{r^2-1}} \left| \sum_{j=2n-1}^{\infty} \tau^j R_n(T_j) \right|$$

bzw.

$$(1.7.18) \quad ||R_n|| = 2\tau r \left| \sum_{j=2n-1}^{\infty} \tau^j R_n(U_j) \right| .$$

Ausgehend von (1.7.17) bzw. (1.7.18) gewinnen wir Abschätzungen für $||R_n||$ dadurch, daß wir $R_n(T_{2n-1})$ und $R_n(T_{2n})$ bzw. $R_n(U_{2n-1})$ und $R_n(U_{2n})$ berechnen und $R_n(T_{2n+k})$ bzw. $R_n(U_{2n+k})$ für $k \in \mathbb{N}$ abschätzen.

Nach (1.7.10) gilt

$$(1.7.19) \quad R_n(q_{2n-1}) = -2^{2n-1} n[(n-1)!]^4 / [(2n-1)!]^2 .$$

Da der Höchstkoeffizient von T_{2n-1} 2^{2n-2} ist und derjenige von U_{2n-1} 2^{2n-1} , ergibt sich daraus sofort

$$(1.7.20) \quad -R_n(T_{2n-1}) = 2^{4n-3} n[(n-1)!]^4 / [(2n-1)!]^2 =: c_n$$

und

$$(1.7.21) \quad R_n(U_{2n-1}) = -2c_n .$$

Um $R_n(T_{2n})$ und $R_n(U_{2n})$ zu berechnen, benötigen wir $R_n(q_{2n})$. Dazu gehen wir wie im Paragraphen 1.5 vor. Die Stützstellen der Radau-Formel Q_n sind die Nullstellen von $P_n - P_{n-1}$; dabei sind P_k , $k \in \mathbb{N}_0$, die Legendre-Polynome (siehe etwa Braß [6; S. 91]). Für P_k gilt

$$P_k(x) = \frac{(2k)!}{2^k (k!)^2} x^k + \tau_{k-2}$$

mit Grad $\pi_{k-2} = k-2$ (siehe S. 46). Es gilt also

$$[P_n(x) - P_{n-1}(x)] P_n(x) = \frac{[(2n)!]^2}{2^{2n} (n!)^4} x^{2n} - \frac{(2n)! (2n-2)!}{2^{2n-1} (n!)^2 [(n-1)!]^2} x^{2n-1} + \pi_{2n-2}(x).$$

$$\text{Da } \int_{-1}^1 [P_n(x) - P_{n-1}(x)] P_n(x) dx = \int_{-1}^1 P_n^2(x) dx = 2/(2n+1)$$

(siehe S. 46), $Q_n([P_n - P_{n-1}] P_n) = 0$ und $R_n(\pi_{2n-2}) = 0$ gilt, ergibt sich hieraus mit (1.7.19)

$$(1.7.22) \quad R_n(q_{2n}) = - \frac{2^{2n+2} (n!)^4}{(4n^2-1) [(2n)!]^2}.$$

Da der Höchstkoeffizient von $T_{2n} 2^{2n-1}$ ist und derjenige von $U_{2n} 2^{2n}$, ergibt sich daraus sofort

$$(1.7.23) \quad R_n(T_{2n}) = - \frac{2^{4n+1} (n!)^4}{(4n^2-1) [(2n)!]^2}$$

und

$$(1.7.24) \quad R_n(U_{2n}) = - \frac{2^{4n+2} (n!)^4}{(4n^2-1) [(2n)!]^2}.$$

Nun schätzen wir $R_n(T_j)$ und $R_n(U_j)$ für $j > 2n$ ab. Für j gerade gilt (siehe (1.5.38))

$$\int_{-1}^1 T_j(x) dx = -2/(j^2-1), \quad \int_{-1}^1 U_j(x) dx = 2/(j+1);$$

für j ungerade verschwinden beide Integrale. Mit $\|T_j\|_{\infty} = 1$, $\|U_j\|_{\infty} = j+1$ und $\sum_{i=1}^n w_i = 2$ folgen leicht die Abschätzungen

$$(1.7.25) \quad |R_n(T_j)| \leq \begin{cases} 2 + 2/(j^2-1) & \text{für } j \text{ gerade} \\ 2 & \text{für } j \text{ ungerade} \end{cases}$$

und

$$(1.7.26) \quad |R_n(U_j)| \leq \begin{cases} 2(j+1) + 2/(j+1) & \text{für } j \text{ gerade} \\ 2(j+1) & \text{für } j \text{ ungerade.} \end{cases}$$

Damit gilt

$$\begin{aligned} \sum_{j=2n+1}^{\infty} |R_n(T_j)| &\leq \tau^j \sum_{j=n}^{\infty} \tau^{2j+1} + 2 \left[1 + \frac{1}{4(n+1)^2-1} \right] \sum_{j=n+1}^{\infty} \tau^{2j} \\ &= \tau^{2n} \left[1 + \frac{4(n+1)^2}{4(n+1)^2-1} \tau \right] / \sqrt{r^2-1}, \end{aligned}$$

und mit (1.7.17), (1.7.20) und (1.7.23) ergibt sich

$$(1.7.27) \quad \|R_n\| \leq \frac{2r\tau^{2n-1}}{\sqrt{r^2-1}} \left\{ c_n \left[1 + \frac{4n}{4n^2-1} \tau \right] + \frac{\tau}{\sqrt{r^2-1}} \left[1 + \frac{4(n+1)^2}{4(n+1)^2-1} \tau \right] \right\};$$

dabei ist $c_n = 2^{4n-3} n[(n-1)!]^4 / [(2n-1)!]^2$.

Analog erhält man aus (1.7.18) mit (1.7.21), (1.7.24) und (1.7.26)

$$\begin{aligned} (1.7.28) \quad \|R_n\| &\leq 2r\tau^{2n} \left\{ 2c_n \left[1 + \frac{4n}{4n^2-1} \tau \right] + \tau \frac{(2n+2)-(2n+1)\tau}{r-1} \right. \\ &\quad \left. + \frac{\tau^2}{(2n+3)\sqrt{r^2-1}} \right\}. \end{aligned}$$

Die Abschätzungen (1.7.16), (1.7.27) und (1.7.28) haben wir mit Hilfe von (1.7.14) hergeleitet. Wir leiten nun weitere, für alle n geltende Abschätzungen mit einem gegenüber den oben angegebenen Schranken geringfügigen Verlust an Genauigkeit her. Dabei gehen wir von (1.1.5) aus und machen von Lemma 3 Gebrauch.

R_n^L ist das Fehlerfunktional der Lobatto-Quadraturformel mit n Knoten. Es gilt

$$\begin{aligned}
 \|R_n\| &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|R_n(q_k)|}{r^k} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|R_n(q_{2k+1})|}{r^{2k+1}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|R_n(q_{2k})|}{r^{2k}} \\
 &= |R_n(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{q_{2k+1}}{r^{2k+1}})| + \sum_{k=n}^{\infty} \frac{|R_n(q_{2k})|}{r^{2k}} \\
 &\leq r|R_n(\varphi_3)| + \sum_{k=n-1}^{\infty} \frac{|R_n^L(q_{2k})|}{r^{2k}} - \frac{|R_n^L(q_{2n-2})|}{r^{2n-2}} \\
 &= r|R_n(\varphi_3)| + |R_n^L(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{q_{2k}}{r^{2k}})| - \frac{|R_n^L(q_{2n-2})|}{r^{2n-2}} \\
 &= r|R_n(\varphi_3)| + r^2|R_n^L(\varphi_2)| - \frac{|R_n^L(q_{2n-2})|}{r^{2n-2}}
 \end{aligned}$$

mit $\varphi_2(x) = 1/(r^2 - x^2)$ und $\varphi_3(x) = x/(r^2 - x^2)$.

Die erste Gleichheit gilt wegen (1.1.5), die dritte wegen (1.7.11) und die vierte wegen der Definitheit der Lobatto-Formeln. Die Ungleichung folgt aus Lemma 3. Mit $\|R_n^L\| = r^2|R_n^L(\varphi_2)|$ (siehe (1.2.4)) schreibt sich dies als

$$(1.7.29) \quad \|R_n\| \leq r|R_n(\varphi_3)| + \|R_n^L\| - \frac{|R_n^L(q_{2n-2})|}{r^{2n-2}}.$$

Abschätzungen für $\|R_n^L\|$ haben wir schon hergeleitet. Nun schätzen wir $R_n(\varphi_3)$ ab. Mit $t := \tau^2 = (r - \sqrt{r^2 - 1})^2$, $r > 1$, und $\mu := 2$, $\nu := 1$, $a := 4t/(1-t)$ und $b := 0$ ergibt sich aus (1.4.6) $\varphi(x) = x/(r^2 - x^2)$, also $\varphi = \varphi_3$. Aus Korollar 1 folgt damit

$$(1.7.30) \quad \varphi_3(x) = \frac{2\tau}{\sqrt{r^2 - 1}} \sum_{j=0}^{\infty} \tau^{2j} T_{2j+1}(x),$$

und für den Minimalabstand

$$(1.7.31) \quad E_{2n-2}(\varphi_3) = \tau^{2n-2}/[2r(r^2 - 1)].$$

Es gilt also

$$|R_n(\varphi_3)| = \left| \sum_{i=1}^n w_i \varphi_3(x_i) \right| \leq E_{2n-2}(\varphi_3) \sum_{i=1}^n w_i = 2E_{2n-2}(\varphi_3)$$

und damit

$$(1.7.32) \quad |R_n(\varphi_3)| \leq \tau^{2n-2} / [r(r^2-1)] .$$

Mit (1.7.20) und (1.7.25) ergibt sich aus (1.7.30)

$$\begin{aligned} |R_n(\varphi_3)| &= \frac{2\tau}{\sqrt{r^2-1}} \left| \sum_{j=n-1}^{\infty} \tau^{2j} R_n(T_{2j+1}) \right| \\ &\leq \frac{2\tau}{\sqrt{r^2-1}} \{ \tau^{2n-2} |R_n(T_{2n-1})| + \sum_{j=n}^{\infty} \tau^{2j} |R_n(T_{2j+1})| \} \\ &\leq \frac{2\tau}{\sqrt{r^2-1}} \{ \tau^{2n-2} |R_n(T_{2n-1})| + 2 \sum_{j=n}^{\infty} \tau^{2j} \} , \end{aligned}$$

also

$$(1.7.33) \quad |R_n(\varphi_3)| \leq \frac{2\tau^{2n-1}}{\sqrt{r^2-1}} [c_n + \tau/\sqrt{r^2-1}]$$

$$\text{mit } c_n = 2^{4n-3} n! [(n-1)!]^4 / [(2n-1)!]^2 .$$

Analog erhält man durch Entwicklung von φ_3 nach Tschebyscheff-Polynomen 2. Art, also aus

$$(1.7.34) \quad \varphi_3(x) = 2\tau^2 \sum_{j=0}^{\infty} \tau^{2j} U_{2j+1}(x) ,$$

mit (1.7.21) und (1.7.26) die Abschätzung

$$(1.7.35) \quad |R_n(\varphi_3)| \leq \tau^{2n} \{ 4c_n + [(2n+1) - (2n-1)\tau^2] / (r^2-1) \} .$$

Aus (1.7.29) ergeben sich mit einer der drei Abschätzungen (1.4.35), (1.5.58), (1.5.59) und einer der Abschätzungen (1.7.32), (1.7.33), (1.7.35) Schranken für die Norm des Fehlerfunktional von Radau-Formeln.

Zum Ende dieses Abschnitts beschäftigen wir uns mit der Herleitung von Abschätzungen für $\|R_n\|$ bei Gauß-Formeln zur Gewichtsfunktion $w(x) := 1+x$. Die Eigenschaften dieser Formeln werden wir bei der Herleitung von Abschätzungen für das "konische" Produkt bei der Integration über ein Dreieck benötigen.

Aus (1.5.12) ergibt sich sofort

$$(1.7.36) \quad \forall_{k \in \mathbb{N}_0} \quad R_n(q_{2k}) \geq 0.$$

Für $2 \leq n \leq 30$ gilt $R_n(q_{2k+1}) \geq 0$, $k \in \mathbb{N}_0$; dies wurde wie folgt verifiziert: Nach (1.7.36) gilt

$$R_n(q_{2k}) = \int_{-1}^1 (1+x)x^{2k} dx - \sum_{i=1}^n w_i x_i^{2k} = 2/(2k+1) - \sum_{i=1}^n w_i x_i^{2k} \geq 0.$$

Zu zeigen ist, daß $R_n(q_{2k+2l+1}) \geq 0$ gilt, also

$$2/(2k+2l+3) - \sum_{i=1}^n w_i x_i^{2k+2l+1} \geq 0$$

oder

$$2/(2k+1) - \sum_{i=1}^n w_i x_i^{2k+2l+1} (2k+2l+3)/(2k+1) \geq 0.$$

Hinreichend dafür ist offenbar

$$x_n \leq \left(\frac{2k+1}{2k+2l+3} \right)^{1/(2l+1)}.$$

Für $2 \leq n \leq 30$, $l=n$ und $k=6n$ ist diese Bedingung erfüllt; wegen der Monotonie ist sie auch für $k > 6n$ erfüllt, es gilt also

$$(1.7.37) \quad \forall_{2 \leq n \leq 30} \quad \forall_{j \geq 7n} \quad R_n(q_{2j+1}) \geq 0.$$

Da auch

$$(1.7.38) \quad \forall_{2 \leq n \leq 30} \quad \forall_{n \leq j \leq 7n} \quad R_n(q_{2j+1}) \geq 0$$

numerisch verifiziert wurde, ist die Bedingung (1.2.1) erfüllt.

Nach (1.4.15) gilt also

$$(1.7.39) \quad \|R_n\| \leq 4r\tau^{2n-1}/(r^2-1) \quad .$$

Durch Berechnung von $R_n(T_{2n})$, $R_n(T_{2n+1})$ bzw. $R_n(U_{2n})$, $R_n(U_{2n+1})$ und Abschätzung von $R_n(T_{2n+j})$ bzw. $R_n(U_{2n+j})$ für $j \geq 2$ ergeben sich aus (1.5.5) bzw. (1.5.6) weitere Abschätzungen für $\|R_n\|$.

Stützstellen der Gauß-Formel Q_n zu $w(x)=1+x$ sind die Nullstellen des Jacobi-Polynoms $P_n^{(0,1)}$. Aus

$$P_k^{(0,1)}(x) = 2^{-k} \binom{2k+1}{k} x^k - 2^{-k} \binom{2k}{k-1} x^{k-1} + \pi_{k-2}(x)$$

mit $\text{Grad } \pi_{k-2} \leq k-2$ (siehe z.B. Davis [18; S. 249, Thm. 10.3.4]) folgt

$$\begin{aligned} P_n^{(0,1)}(x) P_{n+1}^{(0,1)}(x) &= \frac{(2n+1)!(2n+3)!}{2^{2n+1} n! [(n+1)!]^2 (n+2)!} x^{2n+1} - \\ &- \frac{(4n^2+6n+1)(2n)!(2n+2)!}{2^{2n+1} n! [(n+1)!]^2 (n+2)!} x^{2n} + \pi_{2n-1}(x). \end{aligned}$$

Da $R_n(P_n^{(0,1)} P_{n+1}^{(0,1)}) = 0$ und $R_n(\pi_{2n-1}) = 0$ gilt, folgt hieraus

$$(1.7.40) \quad R_n(q_{2n+1}) = \frac{4n^2+6n+1}{4n^2+8n+3} R_n(q_{2n})$$

(vergleiche (1.7.38)); dabei ist

$$(1.7.41) \quad R_n(q_{2n}) = 2^{2n+1} (n!)^4 (n+1) / [(2n+1)!]^2 =: \delta_n$$

(Davis-Rabinowitz [20; S. 75, Formel (2.7.10)]).

Eine einfache Rechnung ergibt

$$\int_{-1}^1 (1+x) T_{2j}(x) dx = -2/(4j^2-1)$$

und

$$\int_{-1}^1 (1+x) T_{2j+1}(x) dx = -1/(4j^2-1) - 1/(4j^2+8j+3), \quad j \in \mathbb{N}.$$

Da die weiteren Rechnungen analog zu denen im Paragraphen 1.5 durchgeführt werden können, geben wir hier nur die Ergebnisse an:

$$(1.7.42) \quad \|R_n\| \leq \frac{2r\tau^{2n}}{\sqrt{r^2-1}} \left\{ 2^{2n-1} \delta_n \left[1 + \frac{8n^2+12n+2}{4n^2+8n+3} \tau \right] + \right. \\ \left. + \frac{\tau}{2\sqrt{r^2-1}} \left[\frac{4(n+1)^2}{4n^2+8n+3} + \frac{\tau}{4n^2+8n+15} \right] + \frac{1}{4n^2+8n+3} \frac{\tau^2}{1-\tau} \right\},$$

$$(1.7.43) \quad \|R_n\| \leq 2r\tau^{2n+1} \left\{ 2^{2n} \delta_n \left[1 + \frac{8n^2+12n+2}{4n^2+8n+3} \tau \right] + \right. \\ \left. + \frac{(2n+3)-(2n+2)\tau}{2(r-1)} + \frac{\tau}{\sqrt{r^2-1}} \left[\frac{1}{2n+3} + \frac{(2n+4)\tau}{4(n+2)^2-1} \right] \right\};$$

δ_n wurde in (1.7.41) definiert.

Bemerkung: Ich vermute, daß für Gauß-Quadraturformeln zu den Gewichtsfunktionen $(1-x)^\alpha(1+x)^\beta$ mit $\beta > \alpha$

$$(1.7.44) \quad \forall_{n,k \in \mathbb{N}} \quad R_n(q_{2k-1}) \geq 0$$

gilt. Eine einfache Substitution zeigt, daß dies äquivalent zu

$$(1.7.45) \quad \forall_{n,k \in \mathbb{N}} \quad R_n(q_{2k-1}) \leq 0$$

für $\beta < \alpha$ ist. Wie man analog zur Herleitung von (1.7.40) nachrechnet, ist $R_n(q_{2n+1})$ positiv bzw. negativ je nachdem, ob $\beta > \alpha$ oder $\beta < \alpha$ gilt.

Zusammenfassung der Resultate:

Zunächst wurde eine Abschätzung der Norm des Restfunktions von Filippi-Quadraturformeln hergeleitet, die für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ und für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch proportional zu $1/\sqrt{r-1}$ ist.

Dann zeigten wir die Nichtdefinitheit der Clenshaw-Curtis-Formeln für $n \geq 4$.

Für symmetrische Quadraturformeln ohne die Voraussetzung (1.2.2) wurden mit Hilfe eines Ergebnisses von Braß-Schmeißer [8] Abschätzungen für $\|R_n\|$ hergeleitet. Diese Abschätzungen sind für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ und verhalten sich für $r \rightarrow 1+$ wie $1/(r-1)$.

Schließlich wurden scharfe Abschätzungen für $\|R_n\|$ bei unsymmetrischen Formeln, genauer bei Radau-Formeln und Gauß-Formeln Q_n , $2 \leq n \leq 30$, zur Gewichtsfunktion $1+x$ angegeben. Auch diese Abschätzungen sind für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$ und für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch proportional zu $1/(r-1)$.

1.8 Vergleich der Abschätzungen - Numerische Beispiele

In diesem Abschnitt vergleichen wir die im ersten Kapitel hergeleiteten Abschätzungen am repräsentativen Spezialfall der Gauß-Legendre-Quadraturformeln. Dazu untersuchen wir das asymptotische Verhalten der Abschätzungen untereinander, und zwar für $r \rightarrow \infty$ und $r \rightarrow 1+$ bei festem n und für $n \rightarrow \infty$ bei festem r .

Im nichtasymptotischen, endlichen Bereich stellen wir für die Gauß-Legendre-Formel Q_3 das Fehlerverhalten in bezug auf r als Diagramm dar. Schließlich verdeutlichen wir dieses Verhalten anhand von zwei Beispielen.

In dieser Arbeit wurden die folgenden Abschätzungen der durch $|\cdot|_r$ induzierten Norm des Fehlerfunktionalen von Gauß-Legendre-Formeln hergeleitet:

$$\sigma_n^H(r) = \frac{D_n^0}{2n} r \left[\frac{1}{(r-1)^{2n}} - \frac{1}{(r+1)^{2n}} \right] / 2^{2n},$$

$$\sigma_n^A(r) = \left\{ \frac{2r\tau^2[2+(2n-1)\tau^2]}{4n^2-1} + \frac{1}{\sqrt{r^2-1}} \right\} \frac{\tau^{2n-2}}{\sqrt{r^2-1}},$$

$$\sigma_n^T(r) = \frac{2r\tau^{2n}}{\sqrt{r^2-1}} \left\{ D_n^0 \left| 1 - \left[1 + \frac{2n+1}{(2n-1)(2n+3)} \right] \tau^2 \right| + \frac{4(n+2)^2}{4(n+2)^2-1} \frac{\tau^3}{\sqrt{r^2-1}} \right\},$$

$$\sigma_n^U(r) = 2r\tau^{2n+1} \left\{ 2D_n^0 \left[1 - \frac{(2n+1)\tau^2}{(2n-1)(2n+3)} \right] + \left[2 + (2n+3) \frac{1}{2n+5} (1-\tau^2) \right] \frac{\tau^2}{2(r^2-1)} \right\},$$

$$\sigma_n^*(r) = \frac{D_n^0}{2^{2n-1}} \frac{1}{r^{2n}} \left[1 + \frac{(2n+1)(n^2+n-1)}{(2n-1)(2n+3)} \frac{1}{r^2} \right] + \frac{2}{2n+5} \frac{1}{r^{2n+2}} \frac{1}{(r^2-1)},$$

$$\sigma_n^L(r) = \frac{1}{2r^{n-1}} \ln \frac{r+1}{r-1} \left\{ \tau^n + \left[r - \frac{4}{2} \frac{\sqrt{r^2-1}}{2} (\sqrt{r+1} + \sqrt{r-1}) \right]^n \right\}.$$

Dabei ist $r = r - \sqrt{r^2 - 1}$ und $D_n^o = 2^{4n} (n!)^4 / \{(2n+1) [(2n)!]^2\}$.

Sei zunächst n fest. Der folgenden Tabelle ist das asymptotische Verhalten des Quotienten zweier Abschätzungen für $r \rightarrow 1+$ zu entnehmen:

σ_n^*	∞				
σ_n^U	∞	$2n+5$			
σ_n^T	∞	$c_n(T,*)$	$\frac{4(n+2)^2}{4(n+2)^2-1}$		
σ_n^A	∞	$\frac{2n+5}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{4(n+2)^2-1}{8(n+2)^2}$	
σ_n^H	∞	∞	∞	∞	∞
Zähler Nenner	σ_n^L	σ_n^*	σ_n^U	σ_n^T	σ_n^A

Dabei sei $c_n(T,*) := 4(n+2)^2(2n+5)/[4(n+2)^2-1]$.

σ_n^L ist für $r \rightarrow 1+$ asymptotisch gleich $\|R_n\|$, σ_n^H verhält sich wie $1/(r-1)^{2n}$; die übrigen Abschätzungen verhalten sich für $r \rightarrow 1+$ wie $1/(r-1)$.

In der nächsten Tabelle wird das asymptotische Verhalten des Quotienten zweier Abschätzungen für $r \rightarrow \infty$ bei festem n angegeben.

σ_n^*	ξ_n				
σ_n^U	ξ_n	1			
σ_n^T	ξ_n	1	1		
σ_n^A	$\xi_n \xi'_n$	ξ'_n	ξ'_n	ξ'_n	
σ_n^H	ξ_n	1	1	1	$1/\xi'_n$
Zähler Nenner	σ_n^L	σ_n^*	σ_n^U	σ_n^T	σ_n^A

Dabei seien $\xi_n := 2^{n+1} D_n^\circ / (3^n + 4^n)$ und $\xi'_n := 8n^2 / [(4n^2 - 1) D_n^\circ]$.

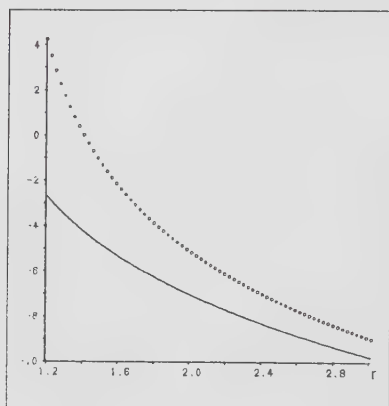
Alle diese Abschätzungen sind für $r \rightarrow \infty$ asymptotisch proportional zu $\|R_n\|$; σ_n^H , σ_n^T , σ_n^U und σ_n^* sind sogar asymptotisch gleich $\|R_n\|$.

Sei jetzt r fest. Der folgenden Tabelle ist das asymptotische Verhalten des Quotienten zweier Schranken für $n \rightarrow \infty$ zu entnehmen:

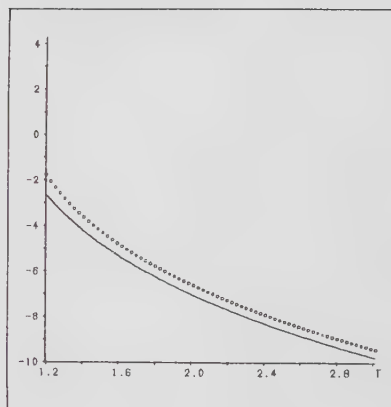
σ_n^*	∞				
σ_n^U	0	0			
σ_n^T	0	0	0		
σ_n^A	0	0	0	$C_r(A, T)$	
σ_n^H	$0, r > c$ $\infty, r < c$	$0, r > 2$ $\infty, r < 2$	∞	∞	∞
Zähler Nenner	σ_n^L	σ_n^*	σ_n^U	σ_n^T	σ_n^A

Hierbei seien $C_r(A, T) := 1/\{2r\tau^3[\pi(r^2-1)+\tau^2]\}$ und $c := 3.3206283702$. Diese Beziehungen sieht man mit Hilfe der Stirlingschen Formel leicht ein.

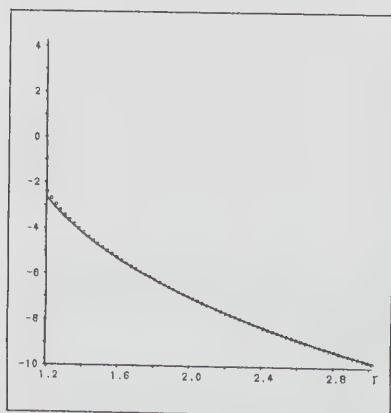
Sei R_3 das Fehlerfunktional der Gauß-Legendre-Formel mit drei Stützstellen. In den folgenden sechs Skizzen wird der Logarithmus von $\|R_3\|$ zusammen mit dem Logarithmus einer der obigen Abschätzungen ($n=3$) dargestellt. $\|R_3\|$ läßt sich aus (1.2.2) bestimmen.



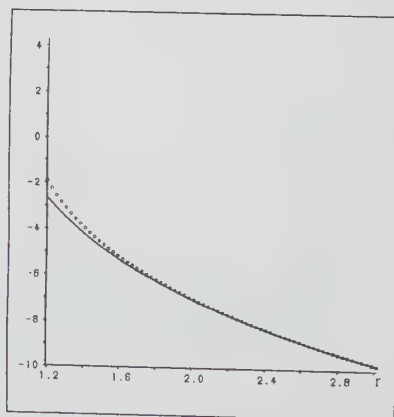
$\ln \sigma_3^H$, $\ln ||R_3||$



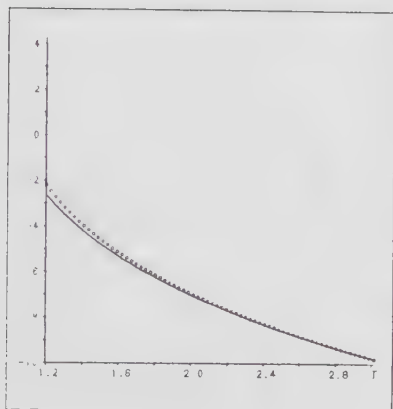
$\ln \sigma_3^A$, $\ln ||R_3||$



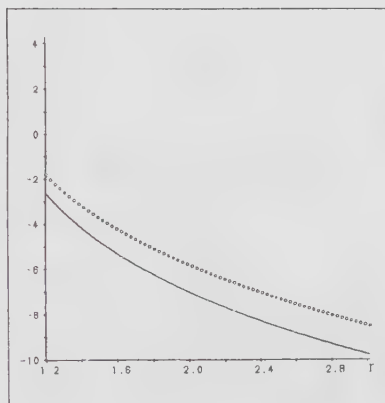
$\ln \sigma_3^T$, $\ln ||R_3||$



$\ln \sigma_3^U$, $\ln ||R_3||$



$$\ln \sigma_3^* , \quad \ln \|R_3\|$$



$$\ln \sigma_3^L , \quad \ln \|R_3\|$$

Beispiele:

1. Sei $f(x) := \exp(x^2)$ mit der holomorphen Ergänzung $f(z) = \exp(z^2)$, $f \in X_\infty$.

Der exakte Fehler bei der Approximation von $\int_{-1}^1 \exp(x^2) dx$ mit der Gauß-Legendre-Quadraturformel Q_3 ist $1.18 \cdot 10^{-2}$. Die herkömmliche Abschätzung, welche man aus (1.5.14) und $|f^{(2n)}(\xi)| \leq \max_{x \in [-1,1]} |f^{(2n)}(x)|$ erhält, liefert $2.39 \cdot 10^{-1}$.

Aus

$$|R_3(f)| \leq \inf_{r>1} (\sigma_3(r) |f|_r) \quad \text{bzw.} \quad |R_3(f)| \leq \inf_{r>1} (\sigma_3(r) \sup_{|z|=r} |f(z)|)$$

mit $\sigma_3 \in \{ \sigma_3^H, \sigma_3^A, \sigma_3^T, \sigma_3^U, \sigma_3^*, \sigma_3^L \}$, erhält man

folgende Abschätzungen (das Minimum wird für $r=r_0$ angenommen) :

$\sigma_3 =$ $ f _r$	σ_3^H	σ_3^A	σ_3^T	σ_3^U	σ_3^*	σ_3^L
$ f _r$	$5.80 \cdot 10^{-2}$	$1.89 \cdot 10^{-2}$	$1.23 \cdot 10^{-2}$	$1.27 \cdot 10^{-2}$	$1.34 \cdot 10^{-2}$	$4.03 \cdot 10^{-2}$
	$r_0 = 2.325$	$r_0 = 2$	$r_0 = 2$	$r_0 = 2$	$r_0 = 2$	$r_0 = 2$
$\sup_{ z =r} f(z) $	$3.54 \cdot 10^{-1}$	$9.57 \cdot 10^{-2}$	$6.17 \cdot 10^{-2}$	$6.44 \cdot 10^{-2}$	$6.79 \cdot 10^{-2}$	$1.96 \cdot 10^{-1}$
	$r_0 = 2.25$	$r_0 = 1.925$	$r_0 = 1.9$	$r_0 = 1.925$	$r_0 = 1.95$	$r_0 = 1.85$

2. Sei $f(x) := \log(1+\frac{x}{2})$ mit der holomorphen Ergänzung $f(z) = \log(1+\frac{z}{2})$, $f \in X_2$.

Approximiert man $\int_{-1}^1 \log(1+\frac{x}{2}) dx$ mit der Gauß-Legendre-Formel Q_3 , so beträgt der exakte Fehler $1.69 \cdot 10^{-4}$. Die klassische Abschätzung liefert als Schranke $1.14 \cdot 10^{-2}$.

$|f|_r$, $r \in (1, 2]$, läßt sich nach (1.1.9) durch $\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \|f\|_{2,2}$, also durch $\pi/\sqrt{6} = 1.24$ (siehe Hämmerlin [26]) abschätzen. Ferner gilt $|f|_r = |g|_r$ mit

$$g(z) := f(z) - \left\{ \frac{z}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{z}{2}\right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{z}{2}\right)^3 - \frac{1}{4} \left(\frac{z}{2}\right)^4 + \frac{1}{5} \left(\frac{z}{2}\right)^5 \right\},$$

da Q_3 Exaktheitsgrad 5 hat. Für g gilt (siehe [26]) :

$$\|g\|_{2,2}^2 = \|f\|_{2,2}^2 - 4\pi \left\{ 1 + \frac{1}{2^2} + \frac{1}{3^2} + \frac{1}{4^2} + \frac{1}{5^2} \right\},$$

also $\|g\|_{2,2} = 4.26 \cdot 10^{-1}$.
Aus

$$|R_3(f)| \leq \inf_{r \in (1,2]} (\sigma_3(r) |f|_r) , \quad |R_3(f)| \leq \sigma_3(2) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \|f\|_{2,2} ,$$

$$|R_3(f)| \leq \sigma_3(2) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \|g\|_{2,2}$$

mit $\sigma_3 \in \{ \sigma_3^H, \sigma_3^A, \sigma_3^T, \sigma_3^U, \sigma_3^*, \sigma_3^L \}$ erhält man folgende Abschätzungen :

$\sigma_3 =$ $ f _r \leq$	σ_3^H	σ_3^A	σ_3^T	σ_3^U	σ_3^*	σ_3^L
$ f _r$	$1.27 \cdot 10^{-3}$	$2.96 \cdot 10^{-4}$	$1.93 \cdot 10^{-4}$	$1.99 \cdot 10^{-4}$	$2.09 \cdot 10^{-4}$	$6.29 \cdot 10^{-4}$
	$r_0 = 2$	$r_0 = 2$	$r_0 = 2$	$r_0 = 2$	$r_0 = 2$	$r_0 = 2$
$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \ f\ _{2,2}$	$9.76 \cdot 10^{-3}$	$2.28 \cdot 10^{-3}$	$1.48 \cdot 10^{-3}$	$1.53 \cdot 10^{-3}$	$1.61 \cdot 10^{-3}$	$4.84 \cdot 10^{-3}$
$\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \ g\ _{2,2}$	$3.24 \cdot 10^{-3}$	$7.56 \cdot 10^{-4}$	$4.92 \cdot 10^{-4}$	$5.09 \cdot 10^{-4}$	$5.35 \cdot 10^{-4}$	$1.61 \cdot 10^{-3}$

II. ABSCHÄTZUNG VON KUBATURFEHLERN

In den ersten vier Paragraphen dieses Kapitels werden die Ergebnisse des ersten Kapitels auf Kubaturformeln übertragen, also auf die numerische Integration in mehreren Raumdimensionen. Da die prinzipiellen Schwierigkeiten schon im zweidimensionalen Fall auftreten, beschränken wir uns hier auf diesen.

Im ersten Abschnitt wird die in 1.1 eingeführte Seminorm in den zweidimensionalen Raum übertragen.

Im Abschnitt 2.2 werden dann einfache Darstellungen für die von dieser Seminorm induzierte Norm des Fehlerfunktionalis für eine Klasse von Kubaturformeln hergeleitet.

Im Paragraphen 2.3 wird die numerische Integration über das Einheitsquadrat $[-1,1]^2$ behandelt. Die Gewichtsfunktion w ist dabei von der Form $w(x,y)=w_1(x)w_2(y)$, und die Kubaturformeln sind das Produkt von Gauß-Quadraturformeln zu w_1 bzw. w_2 . Die Norm des Fehlerfunktionalis wird dann mit Hilfe der Resultate des ersten Kapitels scharf abgeschätzt.

Im Abschnitt 2.4 untersuchen wir die numerische Integration über das Dreieck $\Omega := \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : x \in [-1,1], -(1+x)/2 \leq y \leq (1+x)/2\}$ mit konstanter Gewichtsfunktion. Wir betrachten eine Klasse von Kubaturformeln, das sogenannte konische Produkt von Gauß-Quadraturformeln. Auch für diese Kubaturformeln werden scharfe Abschätzungen für die Norm des Fehlerfunktionalis hergeleitet.

Im letzten Abschnitt geben wir Kubaturformeln zur numerischen Integration über ein Dreieck an, die durch Interpolation mit Polynomen entstehen. Hierzu gehören die Kuba-

turformeln von Lauffer [35]. Durch Zusammensetzen von Kubaturformeln für Dreiecke entstehen Kubaturformeln zur Approximation von Integralen über polygonale Gebiete.

Für alle in diesem Paragraphen angegebenen Kubaturformeln leiten wir Fehlerabschätzungen her. Wir untersuchen auch verschiedene Spezialfälle, die Eigenschaften der elementaren Formeln für ein Dreieck bzw. die Lage der Dreiecke, in die ein polygonales Gebiet unterteilt wird, berücksichtigen. Diese Ergebnisse stellen für die Lauffer-Kubaturformeln eine wesentliche Verbesserung der bekannten, auf Phillips [46] zurückgehenden Resultate dar.

2.1 Einführung einer Seminorm

In diesem Paragraphen wird die im Abschnitt 1.1 eingeführte Seminorm in den zweidimensionalen Raum übertragen.

Sei $G_{\rho_1 \rho_2} := \{(z_1, z_2) \in \mathbb{C}^2 : |z_1| < \rho_1, |z_2| < \rho_2\}$. Für $\rho_1, \rho_2 > 1$ definieren wir den Funktionenraum

$$X_{\rho_1 \rho_2} := \{f : f \text{ holomorph in } G_{\rho_1 \rho_2}\}.$$

Sei G eine meßbare Teilmenge von $[-1, 1]^2$ mit nichtverschwindendem Maß und R das Fehlerfunktional

$$\forall f \in X_{\rho_1 \rho_2} \quad R(f) := \iint_G w(x, y) f(x, y) dx dy - \sum_{i=1}^n w_i f(\underline{x}_i)$$

einer Kubaturformel mit $\underline{x}_i \in [-1, 1]^2$, $i=1, \dots, n$, und

$$\forall (x, y) \in G \quad w(x, y) \geq 0, \quad w \in L_1(G), \quad \|w\|_1 \neq 0.$$

Jede Funktion f aus $X_{\rho_1 \rho_2}$ läßt sich für $|z_1| < \rho_1$, $|z_2| < \rho_2$ als Potenzreihe darstellen,

$$(2.1.1) \quad f(z_1, z_2) = \sum_{k, l=0}^{\infty} \alpha_{kl} z_1^k z_2^l.$$

Auf $X_{\rho_1 \rho_2}$ definieren wir die Seminorm

$$(2.1.2) \quad \forall f \in X_{\rho_1 \rho_2} \quad |f|_{r_1 r_2} := \sup_{R(\alpha_{kl}) \neq 0} (|\alpha_{kl}| r_1^k r_2^l)$$

mit $r_1 \in (1, \rho_1)$, $r_2 \in (1, \rho_2)$ und $q_{kl}(x, y) = x^k y^l$.

Für die durch diese Seminorm induzierte Norm des Fehlerfunktionals R gilt die Identität:

$$(2.1.3) \quad || R || = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{|R(q_{kl})|}{r_1^k r_2^l} .$$

Der Nachweis von (2.1.3) verläuft ganz analog zum eindimensionalen Fall (siehe S.10 f). Abschätzungen der Seminorm, die denen im eindimensionalen Fall entsprechen (siehe (1.1.9), (1.1.10)), lassen sich ebenfalls leicht herleiten. Auf eine ausführliche Darstellung wollen wir hier verzichten.

2.2 Einfache Darstellungen für $\| R \|$

In diesem Abschnitt geben wir einfache Darstellungen für $\| R \|$, die grundlegend für unsere Untersuchungen in den nächsten zwei Paragraphen sind.

Wir betrachten Kubaturformeln, deren Fehlerfunktionale der Bedingung

$$(2.2.1) \quad \forall_{k,l \in \mathbb{N}_0} R(q_{kl}) \geq 0$$

genügen. Unter dieser Voraussetzung ergibt sich aus (2.1.3)

$$\| R \| = \sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{R(q_{kl})}{r_1^k r_2^l} = R \left(\sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{q_k}{r_1^k} \frac{q_l}{r_2^l} \right),$$

also

$$(2.2.2) \quad \boxed{\| R \| = r_1 r_2 R(\chi_1)} \quad \text{mit } \chi_1(x,y) := \frac{1}{(r_1-x)(r_2-y)}.$$

Erfüllt das Fehlerfunktional einer Kubaturformel außerdem noch die Bedingung

$$(2.2.3) \quad \forall_{k,l \in \mathbb{N}_0} R(q_{2k+1,1}) = R(q_{k,2l+1}) = 0,$$

so gilt

$$\| R \| = R \left(\sum_{k,l=0}^{\infty} \frac{q_{2k}}{r_1^{2k}} \frac{q_{2l}}{r_2^{2l}} \right),$$

also

$$(2.2.4) \quad \boxed{\| R \| = r_1^2 r_2^2 R(\chi_2)} \quad \text{mit } \chi_2(x,y) := \frac{1}{(r_1^2-x^2)(r_2^2-y^2)}.$$

2.3 Abschätzung von $\|R_n\|$ bei der Integration über ein Rechteck

Sei das Integral I durch

$$I(f) := \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 w_1(x) w_2(y) f(x, y) dx dy, \quad f \in C([-1, 1]^2)$$

gegeben. Eine untere Schranke für die Knotenzahl einer Kubaturformel mit Exaktheitsgrad $2n-1$ ist $n(n+1)/2 + [n/2]$; sie geht auf Möller [42] zurück. Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl werden in Linden-Kroll-Schmid [36] gekennzeichnet. Für spezielle Gewichtsfunktionen werden in [36] und [42] auch Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl bis zum Exaktheitsgrad 9 angegeben.

Für die Gewichtsfunktion $w(x, y) := \sqrt{(1-x^2)(1-y^2)}$ wurden von Morrow-Patterson [43] und Schmid [52] Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl für jeden Exaktheitsgrad konstruiert. Auch für $w(x, y) := 1/\sqrt{(1-x^2)(1-y^2)}$ und für Exaktheitsgrade der Form $4m-1$, $m \in \mathbb{N}$, sind Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl bekannt (siehe hierzu Schmid [53; S. 142 ff]). Abgesehen von diesen Spezialfällen haben ab Exaktheitsgrad $d=10$ die Gauß-Produktformeln unter allen bekannten Kubaturformeln die kleinste Knotenzahl.

Das Produkt von zwei Gauß-Quadraturformeln mit je n Stützstellen zu den Gewichtsfunktionen w_1 bzw. w_2 ist eine Kubaturformel mit n^2 Knoten und Exaktheitsgrad $2n-1$ bezüglich der Gewichtsfunktion w , $w(x, y) := w_1(x) w_2(y)$. Für die Norm des Fehlerfunktionalen solcher Formeln leiten wir in diesem Abschnitt scharfe Abschätzungen her; dabei seien die Funktionen w_1 und w_2 gerade.

Die Integrale I^x, I^y ,

$$\forall \varphi \in C[-1, 1] \quad I^x(\varphi) := \int_{-1}^1 w_1(x) \varphi(x) dx, \quad I^y(\varphi) := \int_{-1}^1 w_2(y) \varphi(y) dy,$$

werden durch die Quadraturformeln Q_n^x bzw. Q_n^y ,

$$\forall \varphi \in C[-1,1] \quad Q_n^x(\varphi) = \sum_{i=1}^n w_i^x \varphi(x_i), \quad Q_n^y(\varphi) = \sum_{i=1}^n w_i^y \varphi(y_i),$$

approximiert. Die zugehörigen Restfunktionale seien definiert durch

$$R_n^x := I^x - Q_n^x, \quad R_n^y := I^y - Q_n^y.$$

Die Kubaturformel K_n ,

$$\forall f \in C([-1,1]^2) \quad K_n(f) := \sum_{i,j=1}^n w_{ij} f(x_i, y_j) \quad \text{mit} \quad w_{ij} := w_i^x w_j^y,$$

heißt Produkt von Q_n^x und Q_n^y (siehe Stroud [55; Chap.2]). K_n hat n^2 Stützstellen. Sei $R_n := I - K_n$ das zugehörige Fehlerfunktional.

Für $f(x,y) = f_1(x)f_2(y)$ gilt:

$$\begin{aligned} R_n(f) &= \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 w_1(x) w_2(y) f_1(x) f_2(y) dx dy - \sum_{i,j=1}^n w_i^x w_j^y f_1(x_i) f_2(y_j) \\ &= \int_{-1}^1 w_1(x) f_1(x) dx \left\{ \int_{-1}^1 w_2(y) f_2(y) dy - \sum_{j=1}^n w_j^y f_2(y_j) \right\} \\ &\quad + \left[\sum_{j=1}^n w_j^y f_2(y_j) \right] \left\{ \int_{-1}^1 w_1(x) f_1(x) dx - \sum_{i=1}^n w_i^x f_1(x_i) \right\}, \end{aligned}$$

also

$$(2.3.1) \quad R_n(f) = I^x(f_1) R_n^y(f_2) + Q_n^y(f_2) R_n^x(f_1).$$

Sind die Bedingungen (2.2.1) und (2.2.3) erfüllt, so ergibt sich damit aus (2.2.4) die Identität

$$(2.3.2) \quad \|R_n\| = r_1^2 r_2^2 \{ I^x(\psi_{r_1}) R_n^y(\psi_{r_2}) + Q_n^y(\psi_{r_2}) R_n^x(\psi_{r_1}) \}$$

und aus Symmetriegründen ganz analog

$$(2.3.3) \quad ||R_n|| = r_1^2 r_2^2 \{ I^Y(\psi_{r_2}) R_n^X(\psi_{r_1}) + Q_n^X(\psi_{r_1}) R_n^Y(\psi_{r_2}) \}$$

mit $\psi_r(t) := 1/(r^2 - t^2)$.

Im folgenden wird exemplarisch der Fall betrachtet, in dem Q_n^X und Q_n^Y Gauß-Quadraturformeln zu den Gewichtsfunktionen w_1 bzw. w_2 sind. Die Einschränkung, daß beide Quadraturformeln dieselbe Knotenzahl haben, wird nur der einfacheren Schreibweise halber gemacht. Dies ist aber auch der in bezug auf das Verhältnis Exaktheitsgrad zu Knotenzahl günstigste Fall; das Produkt von zwei Gauß-Formeln Q_n^X , Q_m^Y hat nämlich nm Knoten und, wie aus (2.3.1) leicht einzusehen ist, Exaktheitsgrad $d = \min(2n-1, 2m-1)$.

Nach (2.3.1) gilt

$$R_n(q_{k1}) = I^X(q_k) R_n^Y(q_1) + Q_n^Y(q_1) R_n^X(q_k);$$

wegen der Symmetrie der Quadraturformeln Q_n^X , Q_n^Y gilt

$R_n^X(q_{2v+1}) = R_n^Y(q_{2v+1}) = 0$, $v \in \mathbb{N}_0$. Mit (1.5.12) ergibt sich insgesamt, daß die Bedingungen (2.2.1) und (2.2.3) erfüllt sind und damit die Darstellungen (2.3.2) und (2.3.3) gelten.

Um aus (2.3.2) Abschätzungen zu erhalten, müssen wir $I^X(\psi_{r_1})$, $Q_n^Y(\psi_{r_2})$ und $R_n^X(\psi_{r_1})$, $R_n^Y(\psi_{r_2})$ abschätzen.

Für $R_n^X(\psi_{r_1})$, $R_n^Y(\psi_{r_2})$ wurden im ersten Kapitel Abschätzungen angegeben; man beachte, daß $||R_n^X|| = r_1^2 R_n^X(\psi_{r_1})$ gilt (siehe (1.2.4) und (1.5.12)). $Q_n^Y(\psi_{r_2})$ ist für kleines n einfach auszuwerten und kann für größeres n ohne großen Verlust an Genauigkeit durch $I^Y(\psi_{r_2})$ abgeschätzt werden (siehe (1.5.12)).

$I^X(\psi_{r_1})$ (bzw. $I^Y(\psi_{r_2})$) läßt sich im allgemeinen nicht elementar berechnen. Eine Möglichkeit zu einer genauen Abschätzung von $I^X(\psi_{r_1})$ (bzw. $I^Y(\psi_{r_2})$) bieten die Quadra-

turformeln vom Lobatto-Typ. Ist nämlich Q_m^L eine Quadraturformel zur Approximation von I^X mit -1 und $+1$ als Stützstellen und Exaktheitsgrad $2m-3$, so gilt $I^X(\psi_{r_1}) \leq Q_m^L(\psi_{r_1})$, da die $(2m-2)$ -te Ableitung von ψ_1 in $(-1,1)$ positiv ist (Krylov [34; S. 170 f]).

Im Fall $w_1(x) = (1-x^2)^\alpha$, $\alpha > -1$, gibt es eine weitere Möglichkeit zur Abschätzung von $I_\alpha^X(\psi_{r_1})$,

$$(2.3.4) \quad I_\alpha^X(\psi_{r_1}) := \int_{-1}^1 (1-x^2)^\alpha \psi_{r_1}(x) dx.$$

Für $\alpha \in \{-1/2, 0, 1/2, 1, \dots\}$ läßt sich das Integral berechnen, und es gilt $I_{\alpha^*}^X(\psi_{r_1}) > I_\alpha^X(\psi_{r_1})$ für $\alpha^* < \alpha$.

Sei im folgenden die Gewichtsfunktion konstant, $w(x) = 1$. $I^X(\psi_{r_1})$ läßt sich explizit berechnen und aus (2.3.2) erhält man

$$\|R_n\| = r_1^2 r_2^2 \left\{ \frac{1}{r_1} \ln \frac{r_1+1}{r_1-1} R_n^Y(\psi_{r_2}) + Q_n^Y(\psi_{r_2}) R_n^X(\psi_{r_1}) \right\}.$$

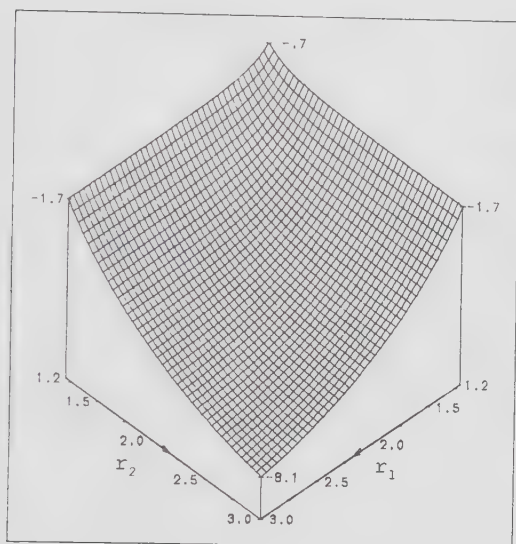
Ist $\sigma_n, \sigma'_n \in \{\sigma_n^H, \sigma_n^A, \sigma_n^T, \sigma_n^U, \sigma_n^*, \sigma_n^L\}$, und schätzt man $r_2^2 R_n^Y(\psi_{r_2})$ durch $\sigma_n(r_2)$ und $r_1^2 R_n^X(\psi_{r_1})$ durch $\sigma'_n(r_1)$ (siehe (1.2.4)) ab, so ergibt sich hieraus

$$(2.3.5) \quad \|R_n\| \leq r_1 \ln \frac{r_1+1}{r_1-1} \sigma_n(r_2) + r_2^2 Q_n^Y(\psi_{r_2}) \sigma'_n(r_1)$$

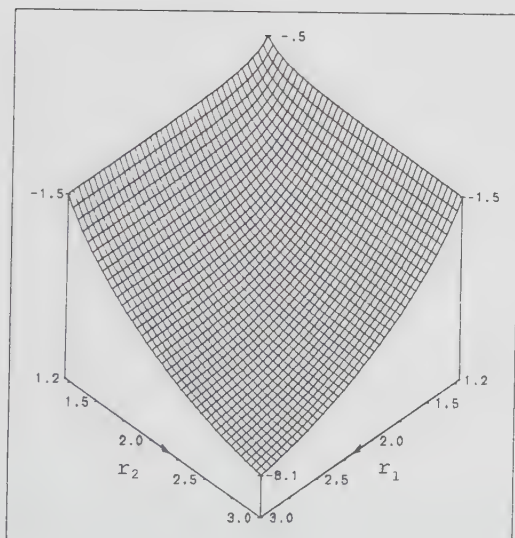
und speziell für $\sigma_n := \sigma'_n := \sigma_n^T$

$$(2.3.6) \quad \|R_n\| \leq r_1 \ln \frac{r_1+1}{r_1-1} \sigma_n^T(r_2) + r_2^2 Q_n^Y(\psi_{r_2}) \sigma_n^T(r_1) \\ =: \sigma_n^\square(r_1, r_2).$$

In den folgenden zwei Diagrammen werden die Logarithmen von $\|R_3\|$ und $\sigma_3^\square$ dargestellt.



$$\ln ||R_3||$$



$$\ln \sigma_3^2$$

Beispiel : Sei $f(x,y) := x^6 \exp(\frac{xy^2}{2})$.

Approximiert man das Integral

$$\int_{-1}^1 \int_{-1}^1 x^6 \exp(\frac{xy^2}{2}) \, dx dy$$

mit dem Produkt von Gauß-Legendre-Quadraturformeln mit drei Stützstellen, so beträgt der exakte Fehler $9.54 \cdot 10^{-2}$.

Aus

$$|R_3(f)| \leq \sigma_3^{\square}(r_1, r_2) |f|_{r_1 r_2}$$

erhält man für $r_1=1.30$ und $r_2=1.48$ die Abschätzung

$$|R_3(f)| \leq 6.32 \cdot 10^{-1} \, .$$

2.4 Abschätzung von $\|R_n\|$ bei der Integration über ein Dreieck

Die Gewichtsfunktion sei in diesem Abschnitt konstant, $w(x,y) := 1$, und der Integrationsbereich ein Dreieck. Für Exaktheitsgrad $d < 6$ sind Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl bekannt, und zwar für $d=1$ die Schwerpunktregel, für $d=2$ eine Formel von Lauffer [35] und eine von Hammer-Stroud [30] mit jeweils 3 Knoten, für $d=3$ eine von Hammer-Marlowe-Stroud [29] und eine von Hammer-Stroud [30] mit jeweils 4 Knoten, für $d=4$ eine Formel von Cowper [15] mit 6 Stützstellen und für $d=5$ eine Formel von Radon [48] mit 7 Stützstellen. Daß diese Formeln minimale Knotenzahl haben, sieht man nach einem Kriterium von Stroud [55; S. 118] bzw. einer Verschärfung davon für ungeraden Exaktheitsgrad von Möller [42].

Für Exaktheitsgrad $d \geq 6$ hat das in diesem Abschnitt zu besprechende konische Produkt von Gauß-Quadraturformeln die kleinste Knotenzahl aller bisher bekannten Kubaturformeln.

Für die Norm des zugehörigen Fehlerfunktionalen leiten wir in diesem Paragraphen Abschätzungen her.

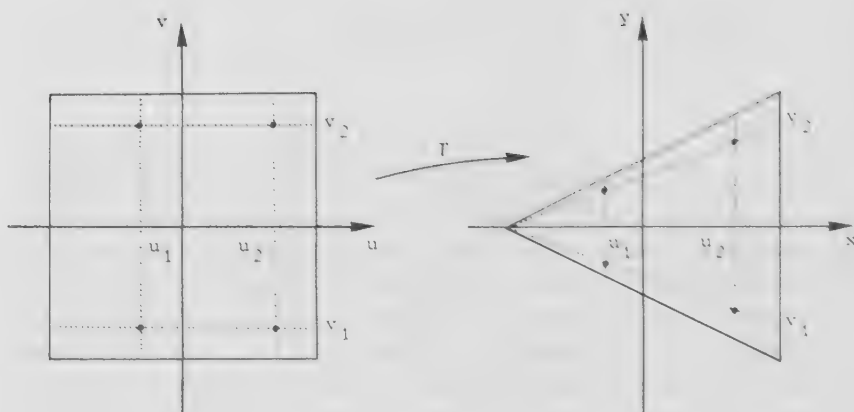
$$\text{Sei } \Omega := \{(x,y) \in \mathbb{R}^2 : x \in [-1,1], -(1+x)/2 \leq y \leq (1+x)/2\}$$

der Integrationsbereich.

Durch die Transformation

$$T : \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \mapsto \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} u \\ v(1+u)/2 \end{pmatrix}$$

wird das Rechteck $[-1,1]^2$ auf Ω abgebildet.



Für $I(f) := \iint_{\Omega} f(x,y) dx dy$, $f \in C(\Omega)$, gilt

$$I(f) := \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \frac{1+u}{2} f \circ T(u,v) du dv.$$

Die Integrale I^u , I^v ,

$$\varphi \in C[-1,1] \quad I^u(\varphi) := \int_{-1}^1 (1+u) \varphi(u) du, \quad I^v(\varphi) := \int_{-1}^1 \varphi(v) dv,$$

werden durch die Gauß-Quadraturformeln zur Gewichtsfunktion $w_1(u) := 1+u$ bzw. $w_2(v) := 1$

$$\varphi \in C[-1,1] \quad Q_n^u(\varphi) = \sum_{i=1}^n w_1^u(u_i) \varphi(u_i), \quad Q_n^v(\varphi) = \sum_{i=1}^n w_1^v(v_i) \varphi(v_i)$$

approximiert. Die Kubaturformel K_n ,

$$\varphi \in C([-1,1]^2) \quad K_n(f) := \sum_{i,j=1}^n w_{ij} f(u_i, \frac{1}{2} v_j (1+u_i)), \quad w_{ij} := \frac{1}{2} w_1^u w_1^v,$$

heißt konisches Produkt von Q_n^u und Q_n^v . Diese Formeln gehen auf Hammer-Marlowe-Stroud [29] zurück (siehe auch Stroud

[55; S. 28 ff]). Für das zugehörige Fehlerfunktional $R_n := I - K_n$ gilt:

$$\begin{aligned} R_n(q_{kl}) &= \iint_{\Omega} x^k y^l dx dy - K_n(q_{kl}) \\ &= \frac{1}{2^l} \left\{ \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 (1+u) u^k (1+u)^l v^l du dv - \sum_{i,j=1}^n w_{ij} u_i^k (1+u_i)^l v_j^l \right\} \\ &= \frac{1}{2^{l+1}} \left\{ \int_{-1}^1 v^l dv - \sum_{j=1}^n w_j^v v_j^l \right\} \int_{-1}^1 u^k (1+u)^{l+1} du \\ &\quad + \frac{1}{2^{l+1}} \left\{ \int_{-1}^1 (1+u) u^k (1+u)^l du - \sum_{i=1}^n w_i^u u_i^k (1+u_i)^l \right\} \sum_{j=1}^n w_j^v v_j^l, \end{aligned}$$

also

$$(2.4.1) \quad R_n(q_{kl}) = \frac{1}{2^{l+1}} \{ R_n^v(q_l) I^u(p_{kl}) + R_n^u(p_{kl}) Q_n^v(q_l) \};$$

dabei ist $p_{kl}(u) := u^k (1+u)^l$, $R_n^v := I^v - Q_n^v$ und $R_n^u := I^u - Q_n^u$.

Hieraus folgt zunächst, daß $R_n(q_{kl})$ für $k+l < 2n$ verschwindet und $R_n(q_{0,2n}) \neq 0$ ist; K_n hat also Exaktheitsgrad $d=2n-1$. Weiterhin folgt mit (1.5.12), (1.7.37-38) und der Symmetrie von Q_n^v , daß für $2 \leq n \leq 30$ die Bedingung (2.2.1) erfüllt ist und für ungerades l $R_n(q_{kl})$ verschwindet, also

$$(2.4.2) \quad \forall_{v \in \mathbb{N}} \quad R_n(q_{k,2v-1}) = 0.$$

Damit gilt nach (2.2.2)

$$(2.4.3) \quad \|R_n\| = r_1 r_2 R_n(\chi_1), \quad \chi_1(x, y) = 1 / [(r_1 - x)(r_2 - y)].$$

Aus (2.4.3) erhalten wir Schranken für $\|R_n\|$, indem wir die Funktion χ_1 nach Polynomen $T_{kl}(x, y) := T_k(x) T_l(y)$ entwickeln, $R_n(T_{2n-2j, 2j})$ für $j=0, \dots, n$ berechnen und

$R_n(T_{k,2l})$ für $k+2l > 2n$ abschätzen.

Mit (1.5.1) ergibt sich (Cauchysches Produkt)

$$\begin{aligned} \chi_1(x, y) = & \frac{4}{\sqrt{(r_1^2-1)(r_2^2-1)}} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=0}^{\infty} \tau_1^i T_{i0}(x, y) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{\infty} \tau_2^j T_{0j}(x, y) \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^{\infty} \left[\sum_{j=1}^{i-1} \tau_1^{i-j} \tau_2^j T_{i-j,j}(x, y) \right] \right\} ; \end{aligned}$$

dabei ist $\tau_1 = r_1 - \sqrt{r_1^2 - 1}$ und $\tau_2 = r_2 - \sqrt{r_2^2 - 1}$.

Da das Cauchysche Produkt zweier gleichmäßig konvergenter Reihen gleichmäßig konvergiert, K_n Exaktheitsgrad $d=2n-1$ hat und $R_n(T_{kl})$ für ungerades l verschwindet (wegen (2.4.2)), folgt hieraus

$$\begin{aligned} R_n(\chi_1) = & \frac{4}{\sqrt{(r_1^2-1)(r_2^2-1)}} \left\{ -\frac{1}{2} \sum_{i=2n}^{\infty} \tau_1^i R_n(T_{i0}) + \frac{1}{2} \sum_{j=n}^{\infty} \tau_2^{2j} R_n(T_{0,2j}) \right. \\ & \left. + \sum_{i=2n}^{\infty} \left[\sum_{j=1}^{i'} \tau_1^{i-2j} \tau_2^{2j} R_n(T_{i-2j,2j}) \right] \right\} \end{aligned}$$

mit $i' := \left\lfloor \frac{i-1}{2} \right\rfloor$.

Nun berechnen wir $R_n(T_{2n-2j,2j})$ für $j=0, \dots, n$. Dazu benötigen wir $R_n(q_{2n-2j,2j})$, $j=0, \dots, n$. Nach (2.4.1) gilt für $j=0, \dots, n-1$

$$\begin{aligned} R_n(q_{2n-2j,2j}) &= \frac{1}{2^{2j+1}} \{ R_n^V(q_{2j}) I_n^U(p_{2n-2j,2j}) + \\ & \quad R_n^U(p_{2n-2j,2j}) Q_n^V(q_{2j}) \} \\ &= \frac{1}{2^{2j+1}} R_n^U(p_{2n-2j,2j}) Q_n^V(q_{2j}) \\ &= \frac{1}{2^{2j+1}} R_n^U(q_{2n}) I_n^V(q_{2j}) , \end{aligned}$$

und mit (1.7.41) ergibt sich

$$(2.4.4) \quad R_n(q_{2n-2j}, 2j) = \frac{C_{1,n}}{(2j+1)2^{2n+2j-2}}, \quad j=0, \dots, n-1;$$

dabei sei

$$(2.4.5) \quad C_{1,n} := 2^{4n-1} (n!)^4 (n+1) / [(2n+1)!]^2.$$

Ferner gilt ebenfalls nach (2.4.1)

$$\begin{aligned} R_n(q_{0,2n}) &= \frac{1}{2^{2n+1}} \{ R_n^V(q_{2n}) I^U(p_{0,2n}) + R_n^U(p_{0,2n}) Q_n^V(q_{2n}) \} \\ &= \frac{1}{2^{2n+1}} \{ R_n^V(q_{2n}) I^U(p_{0,2n}) + R_n^U(q_{2n}) Q_n^V(q_{2n}) \}, \end{aligned}$$

und mit (1.5.14), (1.7.41) folgt

$$(2.4.6) \quad R_n(q_{0,2n}) = C_{2,n} / 2^{2n-2};$$

dabei sei

$$(2.4.7) \quad C_{2,n} := \frac{2^{2n-1} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^2} \left\{ \frac{2^{2n}}{n+1} + \frac{n+1}{(2n+1)^2} \left[1 - \frac{2^{2n} (n!)^4}{[(2n)!]^2} \right] \right\}.$$

Da K_n Exaktheitsgrad $2n-1$ hat und der Höchstkoeffizient von T_k , $k \geq 1$, 2^{k-1} ist, gilt

$$(2.4.8) \quad R_n(T_{2n-2j}, 2j) = \begin{cases} 2^{2n-2} R_n(q_{2n-2j}, 2j), & j=1, \dots, n-1 \\ 2^{2n-1} R_n(q_{2n-2j}, 2j), & j=0, 2n, \end{cases}$$

und mit (2.4.4) folgt

$$\sum_{j=0}^{n-1} \tau_1^{2n-2j} \tau_2^{2j} R_n(T_{2n-2j}, 2j) = C_{1,n} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{\tau_1^{2n-2j} \tau_2^{2j}}{2^{j+1}}$$

mit $\tilde{\tau}_2 := \tau_2/2$.

Ferner ergibt sich mit $|R_n(T_{i,2j})| \leq 4$

$$\sum_{i=2n+1}^{\infty} \tau_1^i |R_n(T_{i0})| \leq 4\tau_1^{n+1}/(1-\tau_1) ,$$

$$\sum_{j=n+1}^{\infty} \tau_2^{2j} |R_n(T_{0,2j})| \leq 4\tau_2^{2n+2}/(1-\tau_2^2)$$

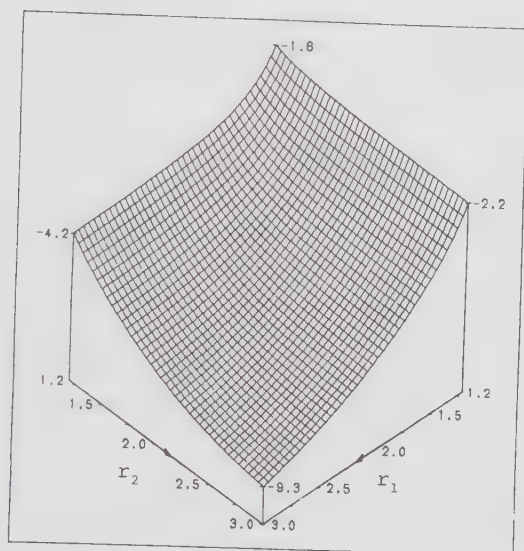
und

$$\begin{aligned} \sum_{i=2n+1}^{\infty} \left\{ \sum_{j=1}^{i'} \tau_1^{i-2j} \tau_2^{2j} |R_n(T_{i-2j,2j})| \right\} &\leq 4 \sum_{i=2n+1}^{\infty} \left\{ \sum_{j=1}^{i'} \tau_1^{i-2j} \tau_2^{2j} \right\} \\ &= 4 \sum_{i=2n+1}^{\infty} \tau_1^i \left\{ \sum_{j=1}^{i'} (\tau_2/\tau_1)^{2j} \right\} = \frac{4\tau_1\tau_2^2(1+\tau_1)}{\tau_1^2-\tau_2^2} \left\{ \frac{\tau_1^{2n}}{1-\tau_1^2} - \frac{\tau_2^{2n}}{1-\tau_2^2} \right\} . \end{aligned}$$

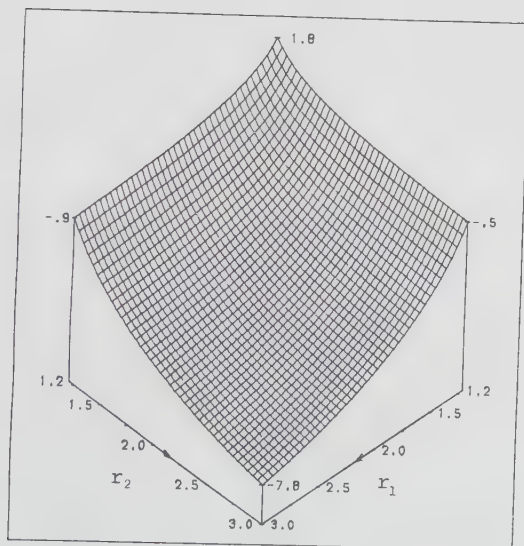
Insgesamt ergibt sich als Hauptresultat dieses Abschnitts :

$$\begin{aligned} (2.4.9) \quad ||R_n|| &\leq \frac{4r_1r_2}{\sqrt{(r_1^2-1)(r_2^2-1)}} \left\{ 2\frac{\tau_1^{2n+1}}{1-\tau_1} + C_{2,n}\tau_2^{2n} + 2\frac{\tau_2^{2n+2}}{1-\tau_2^2} + \right. \\ &\quad \left. + C_{1,n} \sum_{j=0}^{n-1} \frac{\tau_1^{2n-2j} \tau_2^{2j}}{2j+1} + \frac{4\tau_1\tau_2^2(1+\tau_1)}{\tau_1^2-\tau_2^2} \left[\frac{\tau_1^{2n}}{1-\tau_1^2} - \frac{\tau_2^{2n}}{1-\tau_2^2} \right] \right\} \\ &=: \sigma_n^{\Delta}(r_1, r_2) . \end{aligned}$$

In den folgenden zwei Diagrammen werden die Logarithmen von $||R_3||$ und σ_3^{Δ} dargestellt.



$\ln ||R_3||$



$\ln \sigma_3^\Lambda$

Beispiel : Sei $f(x,y) := x^6 \exp(\frac{x^2 y}{4})$.

Approximiert man

$$\int_{\Omega} \int x^6 \exp(\frac{x^2 y}{4}) \, dx dy$$

durch $K_3(f)$, so gilt $R_3(f) = 1.46 \cdot 10^{-1}$.

Aus

$$|R_3(f)| \leq \sigma_3^{\Delta}(r_1, r_2) \|f\|_{r_1 r_2}$$

erhält man für $r_1=1.6$ und $r_2=2.2$ die Abschätzung

$$|R_3(f)| \leq 5.91 \cdot 10^{-1} \, .$$

2.5 Kubatur durch Interpolation

Das Interpolationsproblem ist im $\mathbb{R}^n$, $n \geq 2$, im allgemeinen nicht eindeutig lösbar (siehe etwa Isaacson-Keller [31; S. 294 ff]). Für bestimmte Knotenkonfigurationen liegt jedoch eindeutige Lösbarkeit vor. Dies werden wir benutzen, um Kubaturformeln zur numerischen Integration über Dreiecke und polygonale Gebiete (die in Dreiecke zerlegt werden) zu konstruieren. Als Spezialfall sind darin die Kubaturformeln von Lauffer [35] enthalten.

Für den Interpolationsfehler ist in der Literatur eine Darstellung angegeben. Mit Hilfe dieser Darstellung leiten wir Abschätzungen für den Kubaturfehler her. Diese Abschätzungen stellen für die Kubaturformeln von Lauffer [35] eine wesentliche Verbesserung der bis jetzt bekannten Abschätzungen dar, welche auf Phillips [46] zurückgehen.

Wir fassen zunächst die Resultate über eindeutige Lösbarkeit des Interpolationsproblems und Darstellung des Interpolationsfehlers zusammen:

Lemma 4

Seien $u_i, v_i \in \mathbb{R}$, $i=0, \dots, n$, $u_i + u_j$, $v_i + v_j$ für $i \neq j$ und $\alpha_{ij} \in \mathbb{R}$ mit $i+j \leq n$. Dann gibt es genau ein Polynom q mit Grad $q \leq n$, also $q \in \text{span}\{q_{ij} : i+j \leq n\}$, für das $q(u_i, v_j) = \alpha_{ij}$, $i, j \geq 0$, $i+j \leq n$ gilt; dabei ist $q_{ij}(x, y) = x^i y^j$.

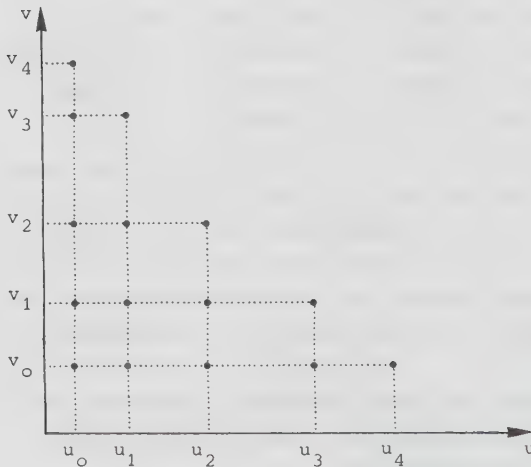
Sei D das Einheitsdreieck $D := \{(u, v) : u, v \geq 0, u+v \leq 1\}$, $S_n := \{(u_i, v_j) : i+j \leq n\} \subset D$, $g \in C^{n+1}(D)$, und q interpoliere g in S_n . Für den Interpolationsfehler e_n ,

$$(2.5.1) \quad e_n(g) := g - q,$$

gilt dann : Zu jedem $(u,v) \in D$ gibt es $\{(\xi_i, \eta_i) : i=0, \dots, n+1\} \subset D$ mit

$$(2.5.2) \quad e_n(g)(u,v) = \frac{1}{(n+1)!} \sum_{i=0}^{n+1} \binom{n+1}{i} \omega_i(u) \tilde{\omega}_{n+1-i}(v) g^{(i, n+1-i)}(\xi_i, \eta_i) ;$$

dabei ist $\omega_0(u) := 1$, $\omega_i(u) := \omega_{i-1}(u)(u-u_{i-1})$ und $\tilde{\omega}_0(v) := 1$,
 $\tilde{\omega}_i(v) := \tilde{\omega}_{i-1}(v)(v-v_{i-1})$, $i=1, \dots, n+1$.



Bemerkung: Eine allgemeinere Fassung dieses Lemmas und den Beweis dazu findet man z.B. bei Stancu [54] oder bei Isaacson-Keller [31; S. 294 ff].

Existenz und Eindeutigkeit des Interpolationspolynoms wurden schon von Biermann [5] gezeigt. In [5] wird auch eine "Darstellung" des Interpolationsfehlers angegeben, nämlich (2.5.2) mit $(\xi_i, \eta_i) = (\xi, \eta)$ für $i=0, \dots, n+1$. Dieses Ergebnis findet sich wiederholt in der Literatur (vgl. z.B. Barnhill [3], Phillips [46], Stancu [54]). Durch ein einfaches Gegenbeispiel wird im folgenden gezeigt, daß diese Darstellung nicht richtig ist:

Sei $S_1 := \{(0,0), (1,0), (0,1)\}$ und $g(u,v) := (u+v)(u-1)(v-1)$. Das eindeutig bestimmte Polynom vom Grad ≤ 1 , welches die Funktion g in S_1 interpoliert, ist $q=0$. Wir setzen in (2.5.2) $\xi_0 := \xi_1 := \xi_2 := \xi$ und $\eta_0 := \eta_1 := \eta_2 := \eta$ und wählen $(u,v) := (1/2, 1/4)$. Wäre die Darstellung von Biermann richtig, so gäbe es $(\xi, \eta) \in D$ mit

$$g\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{4}\right) = -\frac{1}{8}g_{uu}(\xi, \eta) + \frac{1}{8}g_{uv}(\xi, \eta) - \frac{3}{32}g_{vv}(\xi, \eta).$$

Diese Gleichung hat nur die Lösungen $\xi = 3/2$ und η beliebig; es gilt aber $\{(3/2, \eta) : \eta \in \mathbb{R}\} \cap D = \{\}$.

* * *

Durch Integration des Interpolationspolynoms erhält man eine Kubaturformel für das Einheitsdreieck

$$K_n(g) := \iint_D q(u,v) du dv = \sum_{(u_i, v_j) \in S_n} w_{ij} g(u_i, v_j)$$

mit Exaktheitsgrad $d \geq n$; für die Anzahl der Stützstellen (mit nichtverschwindenden Gewichten) m gilt $m \leq \frac{(n+1)(n+2)}{2}$.

Durch eine affine Transformation erhält man daraus eine Kubaturformel mit demselben Exaktheitsgrad und derselben Knotenzahl für ein beliebiges Dreieck $\Delta = ABC$ mit $A = (x_1, y_1)$, $B = (x_2, y_2)$, $C = (x_3, y_3)$.

Sei $f \in C^{n+1}(\Delta)$ und



$$(2.5.3) \quad M_{n+1} := \max_{0 \leq i \leq n+1} \|f^{(i, n+1-i)}\|_{\Delta, \infty}.$$

Durch die Transformation

$$\tilde{T} : \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \longmapsto \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} := \begin{pmatrix} x_1 u + x_2 v + x_3 (1-u-v) \\ y_1 u + y_2 v + y_3 (1-u-v) \end{pmatrix}$$

geht das Einheitsdreieck D auf Δ über.

Sei p das Polynom vom Grad $\leq n$, welches f in $\tilde{T}(S_n)$ interpoliert. Ferner sei $g := f \circ \tilde{T}$ und $q := p \circ \tilde{T}$. Dann ist q ein Polynom vom Grad $\leq n$ und q interpoliert g in S_n . Mit $\tilde{e}_n(f) := f - p$ gilt offenbar

$$(2.5.4) \quad \|\tilde{e}_n(f)\|_{\Delta, \infty} = \|e_n(g)\|_{D, \infty}.$$

Um die Ableitungen abzuschätzen, die auf der rechten Seite von (2.5.1) vorkommen, schreiben wir mit Phillips [46]

$$\frac{\partial g}{\partial u} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial u} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial u} = \left\{ (x_1 - x_3) \frac{\partial}{\partial x} + (y_1 - y_3) \frac{\partial}{\partial y} \right\} f,$$

$$\frac{\partial g}{\partial v} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial v} + \frac{\partial f}{\partial y} \frac{\partial y}{\partial v} = \left\{ (x_2 - x_3) \frac{\partial}{\partial x} + (y_2 - y_3) \frac{\partial}{\partial y} \right\} f$$

und allgemeiner

$$(2.5.5) \quad \frac{\partial^{n+1} g}{\partial u^i \partial v^{n+1-i}} = \left\{ (x_1 - x_3) \frac{\partial}{\partial x} + (y_1 - y_3) \frac{\partial}{\partial y} \right\}^i \left\{ (x_2 - x_3) \frac{\partial}{\partial x} + (y_2 - y_3) \frac{\partial}{\partial y} \right\}^{n+1-i} f.$$

Sei o.E.d.A. $AC \leq BC \leq AB$ und $BC \leq h$. $a_{n,i}$ seien so gewählt, daß

$$(2.5.6) \quad \forall_{0 \leq i \leq n+1} \quad \|g^{(i, n+1-i)}\|_{D, \infty} \leq a_{n,i} M_{n+1} h^{n+1}$$

gilt. Mit

$$(2.5.7) \quad A_n := \sum_{i=0}^{n+1} \binom{n+1}{i} a_{n,i}$$

und

$$(2.5.8) \quad B_n := \max_{0 \leq i \leq n+1} \max_{(u,v) \in D} |\omega_i(u) \tilde{\omega}_{n+1-i}(v)|$$

gilt nach (2.5.2), (2.5.4)

$$(2.5.9) \quad \|\tilde{e}_n(f)\|_{\Delta, \infty} \leq A_n B_n \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} h^{n+1}.$$

Für den Kubaturfehler

$$(2.5.10) \quad R_n(f) := \iint_{\Delta} f(x,y) dx dy - \iint_{\Delta} p(x,y) dx dy$$

gilt dann die Abschätzung

$$(2.5.11) \quad |R_n(f)| \leq |\Delta| A_n B_n \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} h^{n+1}.$$

Phillips [46] schätzt für die Kubaturformeln von Lauffer ($u_i := v_i := i/n$, $i=0, \dots, n$) B_n durch 1 und $a_{n,i}$ durch 2^{n+1} ab, A_n also durch $2^{n+1} \sum_{i=0}^{n+1} \binom{n+1}{i} = 4^{n+1}$, und erhält so die Abschätzung

$$(2.5.12) \quad |R_n(f)| \leq |\Delta| 4^{n+1} \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} h^{n+1}.$$

Der Herleitung entnimmt man, daß (2.5.12) nicht nur für die von Lauffer untersuchten äquidistanten Knoten, sondern allgemein für jede Konfiguration $(u_i, v_j) \in D$, $i+j \leq n$, gilt. Wir betrachten im folgenden einige Spezialfälle, in denen A_n und B_n besser abgeschätzt werden können. Zuvor bemerken wir noch, daß B_n allein von der Knotenkonfiguration, nicht aber von der Lage des Dreiecks Δ abhängt, während A_n ausschließlich durch die Lage des Dreiecks bestimmt wird.

Lemma 5 (Darstellung für B_n)

Seien $u_i := v_i := t_i$, $i=0, \dots, n$, mit $0 \leq t_0 < t_1 < \dots < t_n \leq 1$, und $t_i + t_{n-i} = 1$, d.h. die Punkte t_i seien symmetrisch bezüglich $1/2$. Werden die Teilintervalle zur Mitte hin nicht kleiner, d.h. $t_0 \leq t_1 - t_0 \leq \dots \leq t_{\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor} - t_{\lfloor \frac{n+1}{2} \rfloor - 1}$,

so gilt

$$\forall_{0 \leq i \leq n+1} \quad B_n = \max_{0 \leq u \leq 1} |\omega_i(u) \omega_{n+1-i}(1-u)|,$$

insbesondere also

$$(2.5.13) \quad B_n = \max_{0 \leq u \leq 1} |\omega_{n+1}(u)|.$$

Beweis: Wegen $u_i = v_i$, $i=0, \dots, n$, ist $\omega_i = \tilde{\omega}_i$, $i=0, \dots, n$.
Für $(u, v) \in D$ zeigen wir, daß mit $j := n+1-i$ (i fest)

$$|\omega_i(u) \omega_j(v)| \leq |\omega_i(u) \omega_j(1-u)| \quad \text{oder}$$

$$|\omega_i(u) \omega_j(v)| \leq |\omega_i(1-v) \omega_j(v)|$$

gilt. Wir unterscheiden dazu drei Fälle:

1. Fall: $u \geq t_{i-1}$

In diesem Fall gilt $u - t_1 \leq 1 - v - t_1$, $l=0, \dots, i-1$, und damit

$$|\omega_i(u)| = \prod_{l=0}^{i-1} |u - t_l| = \prod_{l=0}^{i-1} (u - t_l) \leq \prod_{l=0}^{i-1} [(1-v) - t_l] = |\omega_i(1-v)|.$$

2. Fall: $v \geq t_{j-1}$

Analog zum ersten Fall gilt $|\omega_j(v)| \leq |\omega_j(1-u)|$.

3. Fall: $u < t_{i-1}$ und $v < t_{j-1}$

Sei ohne Einschränkung $j \leq i$. Wegen $1-u > 1-t_{i-1} = t_j$, also $|\omega_j(t_j)| \leq |\omega_j(1-u)|$ (vgl. 1. Fall) genügt es zu zeigen, daß $|\omega_j(v)| \leq |\omega_j(t_j)|$ ist. Sei nun $v \in [t_k, t_{k+1}]$, $k \in \{-1, \dots, j-2\}$ (mit $t_{-1} := 0$). Für $l=0, \dots, k$ gilt trivialerweise wegen $t_l \leq v < t_j$: $|v - t_l| = v - t_l \leq t_j - t_l = |t_j - t_l|$. Ferner gilt für $l=1, \dots, (j-1)-k$

$$|v - t_{k+l}| = (t_{k+l} - t_{k+(l-1)}) + (t_{k+(l-1)} - t_{k+(l-2)}) + \dots + (t_{k+1} - v)$$

und

$$|t_j - t_{j-1}| = (t_j - t_{j-1}) + (t_{j-1} - t_{j-2}) + \dots + (t_{j-(l-1)} - t_{j-l})$$

Mit $s_m := t_{k+1-m} - t_{k+1-(m+1)}$ und $\tilde{s}_m := t_{j-m} - t_{j-(m+1)}$ gilt $s_m \leq \tilde{s}_m$, da $j \leq i$ angenommen wurde. Es ist also $|v - t_{k+1}| \leq |t_j - t_{j-1}|$ und somit

$$|\omega_j(v)| = \prod_{l=0}^{j-1} |v - t_l| = \prod_{l=0}^k |v - t_l| \prod_{l=1}^{(j-1)-k} |v - t_{k+l}|$$

$$\leq \prod_{l=0}^k |t_j - t_l| \sum_{l=1}^{(j-1)-k} |t_j - t_{j-1}| = \prod_{l=0}^{j-1} |t_j - t_l| = |\omega_j(t_j)|.$$

Weiterhin gilt

$$|\omega_i(u) \omega_{n+1-i}(1-u)| = \prod_{l=0}^{i-1} |u - t_l| \prod_{l=0}^{n-i} |1-u - t_l|$$

$$= \prod_{l=0}^{i-1} |u - t_l| \prod_{l=0}^{n-i} |u - t_{n-l}| = \prod_{l=0}^{i-1} |u - t_l| \prod_{l=i}^n |u - t_l| = \omega_{n+1}(u).$$

Abschätzung von B_n

a. Seien $u_i := v_i := i/n$, $i=0, \dots, n$ (Formeln von Laufer). Die Voraussetzungen von Lemma 5 sind erfüllt, und es gilt

$$B_n = \max_{0 \leq u \leq 1} \left| \prod_{i=0}^n (u - \frac{i}{n}) \right| \leq \frac{(n-1)!}{4n^n}.$$

Phillips [46] schätzt in diesem Fall B_n durch 1 ab.

b. Seien t_i , $i=0, \dots, n$, die Bilder der Nullstellen von T_{n+1} bei der affinen Transformation von $[-1, 1]$ auf $[0, 1]$ der Größe nach geordnet. Bekanntlich gilt

$$\min_{(u_0, \dots, u_n) \in \mathbb{R}^{n+1}} \max_{0 \leq u \leq 1} \left| \prod_{i=0}^n (u - u_i) \right| = \max_{0 \leq u \leq 1} \left| \prod_{i=0}^n (u - t_i) \right|$$

und für $(u_0, \dots, u_n) \neq (t_0, \dots, t_n)$

$$(2.5.14) \quad \max_{0 \leq u \leq 1} \left| \prod_{i=0}^n (u - u_i) \right| > \max_{0 \leq u \leq 1} \left| \prod_{i=0}^n (u - t_i) \right|.$$

Für $u_i := v_i := t_i$, $i=0, \dots, n$, sind die Voraussetzungen von Lemma 5 erfüllt, und es gilt (Davis [18; S. 60 ff])

$$B_n = 2^{-2n+1}.$$

Wie aus (2.5.14) folgt, wird B_n nur in diesem Fall minimal.

c. Seien $u_0 := v_0 := 0$ und $u_n := v_n := 1$. Sei a^* bzw. b^* die kleinste bzw. die größte Nullstelle des Tschebyscheff-Polynoms erster Art T_{n+1} ; d.h. $a^* = \cos \frac{(2n+1)\pi}{2n+2}$, $b^* = \cos \frac{\pi}{2n+2}$ (Davis [18; S. 61]). Seien t_i , $i=0, \dots, n$, die Bilder der Nullstellen von T_{n+1} bei der affinen Transformation von $[a^*, b^*]$ auf $[0, 1]$, der Größe nach geordnet. Durch ein ähnliches Vorgehen wie beim Beweis des Alternantensatzes (Davis [18; S. 151 f]) sieht man ein, daß

$$\min_{(u_1, \dots, u_{n-1}) \in \mathbb{R}^{n-1}} \max_{0 \leq u \leq 1} |u(u-1) \prod_{i=1}^{n-1} (u-u_i)| = \max_{0 \leq u \leq 1} | \prod_{i=0}^n (u-t_i) |$$

und für $(u_1, \dots, u_{n-1}) \neq (t_1, \dots, t_{n-1})$

$$(2.5.15) \quad \max_{0 \leq u \leq 1} |u(u-1) \prod_{i=1}^{n-1} (u-u_i)| > \max_{0 \leq u \leq 1} | \prod_{i=0}^n (t-t_i) |$$

ist. Für $u_i := v_i := t_i$, $i=1, \dots, n-1$, sind die Voraussetzungen von Lemma 5 erfüllt, und es gilt

$$B_n = 2^{-2n+1} / (\cos \frac{\pi}{2n+2})^{n+1}.$$

Aus (2.5.15) folgt, daß B_n (unter der Bedingung $u_0 = v_0 = 0$, $u_n = v_n = 1$) nur bei dieser Wahl minimal wird.

In diesem Fall hat die Kubaturformel je $n+1$ Stützstellen auf jeder Seite des Dreiecks. Dies ist beim Zusammensetzen zur numerischen Integration über ein polygonales Gebiet von Vorteil.

Bemerkung: Wegen $\lim_{n \rightarrow \infty} (\cos \frac{\pi}{2n+2})^{n+1} = 1$ sind die in b. und c. angegebenen Werte für B_n für $n \rightarrow \infty$ asymptotisch gleich.

Abschätzung von A_n

Wie schon erwähnt, hängt A_n von der Lage des Dreiecks Δ , nicht aber von der Knotenkonfiguration ab. Phillips [46] schätzt A_n unabhängig von der Lage des Dreiecks durch 4^{n+1} ab. In den folgenden Spezialfällen läßt sich A_n genauer abschätzen.

1. Eine der Seiten des Dreiecks, die kleiner oder gleich h sind, liege parallel zur x-Achse. Dann gilt

$$A_n \leq 3^{n+1}.$$

Beweis: Sei ohne Einschränkung BC parallel zur x-Achse, d.h. $y_2=y_3$. Aus (2.5.5) ergibt sich damit

$$\frac{\partial^{n+1} g}{\partial u^i \partial v^{n+1-i}} = \left\{ (x_1-x_3) \frac{\partial}{\partial x} + (y_1-y_3) \frac{\partial}{\partial y} \right\}^i (x_2-x_3)^{n+1-i} \frac{\partial^{n+1-i} f}{\partial x^{n+1-i}}.$$

Schreibt man die rechte Seite aus und schätzt mit der Dreiecksungleichung ab, so erhält man

$$\left\| \frac{\partial^{n+1} g}{\partial u^i \partial v^{n+1-i}} \right\|_{D,\infty} \leq 2^i M_{n+1} h^{n+1}.$$

Mit $a_{n,i} := 2^i$, $i=0, \dots, n+1$, ist also (2.5.6) erfüllt, und nach (2.5.7) gilt

$$A_n = \sum_{i=0}^{n+1} \binom{n+1}{i} 2^i = 3^{n+1}.$$

2. Seien jetzt zwei Seiten des Dreiecks kleiner oder gleich h und parallel zu den Koordinatenachsen. Dann gilt

$$A_n \leq 2^{n+1}.$$

Beweis: Sei ohne Einschränkung BC parallel zur x- und AC parallel zur y-Achse, d.h. $y_2=y_3$ und $x_1=x_3$. (2.5.5) schreibt sich in diesem Fall als

$$\frac{\partial^{n+1} g}{\partial u^i \partial v^{n+1-i}} = (y_1 - y_3)^i (x_2 - x_3)^{n+1-i} \frac{\partial^{n+1} f}{\partial x^i \partial y^{n+1-i}},$$

und daraus ergibt sich

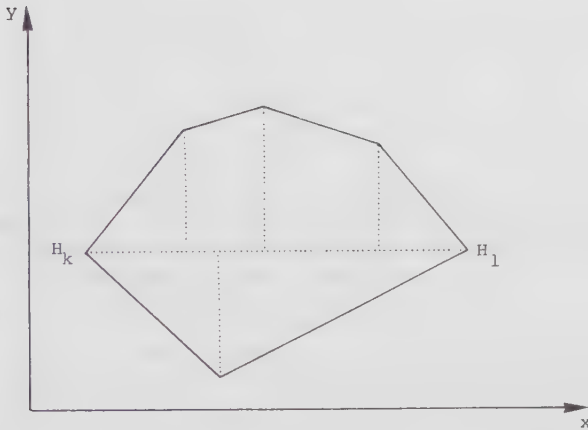
$$\left\| \frac{\partial^{n+1} g}{\partial u^i \partial v^{n+1-i}} \right\|_{D, \infty} \leq M_{n+1} h^{n+1}.$$

Mit $a_{n,i} := 1$, $i=0, \dots, n+1$, ist (2.5.6) erfüllt und aus (2.5.7) folgt

$$A_n = \sum_{i=1}^{n+1} \binom{n+1}{i} = 2^{n+1}.$$

* * *

Bemerkung: Jedes konvexe, polygonale Gebiet läßt sich durch eine Drehung auf ein Gebiet transformieren, welches eine Unterteilung in rechtwinklige Dreiecke mit Katheten parallel zu den Koordinatenachsen zuläßt. Ist nämlich $G=H_1 \dots H_m$ ein polygonales Gebiet, so kann man ohne Einschränkung annehmen, daß eine Verbindungsstrecke $H_k H_1$ mit maximaler Länge parallel zur x-Achse ist, da dies sich durch eine Drehung erreichen läßt. Projiziert man H_i , $i=1, \dots, m$ auf $H_k H_1$, so erhält man eine Zerlegung von G in Dreiecke und Trapeze, deren parallele Seiten parallel zur y-Achse liegen. Jedes dieser Trapeze läßt sich offensichtlich in Dreiecke mit der geforderten Eigenschaft zerlegen. Eine solche Unterteilung läßt sich natürlich beliebig verfeinern.



3. Sei jetzt das Dreieck Δ wieder rechtwinklig aber in allgemeiner Lage. Dann gilt

$$A_n \leq (2\sqrt{2})^{n+1} .$$

Beweis: Die Behauptung folgt unmittelbar aus 2. und der Tatsache, daß beliebige Richtungsableitungen $(n+1)$ -ter Ordnung von f durch $(\sqrt{2})^{n+1} M_{n+1}$ abgeschätzt werden können. Dabei ist M_{n+1} wieder eine Schranke für die partiellen Ableitungen $(n+1)$ -ter Ordnung (vgl. (2.5.3)) .

* * *

Bemerkung: Schranken für den Fehler einer zusammengesetzten Kubaturformel bei der Integration über ein polygonales Gebiet G erhält man durch Summation der Schranken über die Dreiecke einer Triangulierung.

Die Abschätzungen behalten ihre Gestalt, wenn $|\Delta|$ durch $|G|$ ersetzt wird und M_{n+1} eine Schranke für alle partiellen Ableitungen $(n+1)$ -ter Ordnung des Integranden auf G ist. h ist so zu wählen, daß alle Dreiecke der Triangulierung zwei Seiten kleiner oder gleich h haben.

Solange die entsprechenden Voraussetzungen von allen Dreiecken erfüllt werden, können auch die Abschätzungen für A_n und B_n in den Spezialfällen verwendet werden.

LITERATUR

1. Barnhill, R.E. : An error analysis for numerical multiple integration.I. Math. Comp. 22, 98-109 (1968)
2. Barnhill, R.E. : An error analysis for numerical multiple integration.II. Math. Comp. 22, 286-292 (1968)
3. Barnhill, R.E. : Blending function interpolation : A survey and some new results. In: Numerische Methoden der Approximationstheorie. Bd.3 (Hrsg.: L. Collatz, H. Werner, G. Meinardus) ISNM 30, 43-89. Basel-Stuttgart: Birkhäuser Verlag (1976)
4. Barnhill, R.E., G. M. Nielson : An error analysis for numerical multiple integration.III. Math. Comp. 24, 301-314 (1970)
5. Biermann, O. : Über näherungsweise Cubaturen. Monatsh. Math. Phys. 14, 211-225 (1903)
6. Braß, H. : Quadraturverfahren. Göttingen-Zürich: Vandenhoeck und Ruprecht (1977)
7. Braß, H., G. Schmeißer : The definiteness of Filippi's quadrature formulae and related problems. In: Numerische Integration (Hrsg.: G. Hämmerlin) ISNM 45, 109-119. Basel-Boston-Stuttgart: Birkhäuser Verlag (1979)
8. Braß, H., G. Schmeißer : Error estimates for interpolatory quadrature formulae. Numer. Math. 37, 371-386 (1981)
9. Chawla, M.M. : Error bounds for the Gauss-Chebyshev quadrature formula of the closed type. Math. Comp. 22, 889-891 (1968)
10. Chawla, M.M. : On Davis's method for the estimation of

- errors of Gauss-Chebyshev quadratures. SIAM J. Numer. Anal. 6, 108-117 (1969)
11. Chawla, M.M. : Estimating errors of numerical approximation for analytic functions. Numer. Math. 16, 370-374 (1971)
 12. Chawla, M.M., M.K. Jain : Error estimates for Gauss quadrature formulas for analytic functions. Math. Comp. 22, 82-90 (1968)
 13. Chawla, M.M., M.K. Jain : Asymptotic error estimates for the Gauss quadrature formula. Math. Comp. 22, 91-97 (1968)
 14. Copson E.T. : An introduction to the theory of functions of a complex variable. Oxford: Clarendon Press (1935)
 15. Cowper, G.R. : Gaussian quadrature formulas for triangles. Int. J. num. Meth. Engng. 7, 405-408 (1973)
 16. Davis, P.J. : Errors of numerical approximation for analytic functions. J. Rat. Mech. Anal. 2, 303-313 (1953)
 17. Davis, P.J. : Errors of numerical approximation for analytic functions. In: Survey of numerical analysis (Ed.: J. Todd), 468-484. New York: McGraw-Hill Book Co., Inc. (1962)
 18. Davis, P.J. : Interpolation and approximation. New York: Dover Publ., Inc. (1975)
 19. Davis, P.J., P. Rabinowitz : On the estimation of quadrature errors for analytic functions. Math. Tables Aids Comput. 8, 193-203 (1954)
 20. Davis, P.J., P. Rabinowitz : Methods of numerical integration. New York-San Francisco-London: Academic Press (1975)
 21. Engels, H. : Numerical quadrature and cubature. London-New York-Toronto-Sydney-San Francisco: Academic Press (1980)

22. Gröbner, W., N. Hofreiter (Hrsg.) : Integraltafel.
II. Teil, 3., verb. Aufl. Wien: Springer Verlag (1961)
23. Grundmann, A., H.M. Möller : Invariant integration
formulas for the n-simplex by combinatorial methods.
SIAM J. Numer. Anal. 15, 282-290 (1978)
24. Haber, S. : Numerical evaluation of multiple integrals.
SIAM Rev. 12, 481-526 (1970)
25. Hämmerlin, G. : Über ableitungsfreie Schranken für
Quadraturfehler. Numer. Math. 5, 226-233 (1963)
26. Hämmerlin, G. : Über ableitungsfreie Schranken für
Quadraturfehler. II. Ergänzungen und Möglichkeiten zur
Verbesserung. Numer. Math. 7, 232-237 (1965)
27. Hämmerlin, G. : Zur Abschätzung von Quadraturfehlern
für analytische Funktionen. Numer. Math. 8, 334-344
(1966)
28. Hämmerlin, G. : Fehlerabschätzungen bei numerischer
Integration nach Gauß. In: Methoden und Verfahren der
mathematischen Physik (Hrsg.: B. Brosowski, E. Marten-
sen) Bd. 6, 153-163. Mannheim-Wien-Zürich: Bibliogra-
phisches Institut (1972)
29. Hammer, P.C., O.J. Marlowe, A. H. Stroud : Numerical
integration over simplexes and cones. Math. Tables Aids
Comput. 10, 130-137 (1956)
30. Hammer, P.C., A.H. Stroud : Numerical integration over
simplexes. Math. Tables Aids Comput. 10, 137-139 (1956)
31. Isaacson, E., H.B. Keller : Analysis of numerical
methods. New York-London-Sydney: John Wiley and Sons,
Inc. (1966)
32. Knopp, K. : Theorie und Anwendung der unendlichen
Reihen. 5.,bericht. Aufl. Berlin-Göttingen-Heidelberg-
New York: Springer Verlag (1964)
33. Kofron, J. : Die ableitungsfreien Fehlerabschätzungen
von Quadraturformeln. I. Apl. Mat. 17, 39-52 (1972)

34. Krylov, V.I. : Approximate calculation of integrals.
New York-London: The Mac Millan Co. (1962)
35. Lauffer, R. : Interpolation mehrfacher Integrale.
Archiv der Math. 6, 159-164 (1955)
36. Linden, J., N. Kroll, H.J. Schmid : Minimale Kubaturformeln für Integrale über dem Einheitsquadrat. Bonn: SFB 72, prep. no. 373 (1980)
37. Lo, Y.T., S.W. Lee, B. Sun : On Davis' method of estimating quadrature errors. Math. Comp. 19, 133-138 (1965)
38. Locher, F. : Fehlerabschätzungen für das Quadraturverfahren von Clenshaw und Curtis. Computing 4, 304-315 (1969)
39. Lyness, J.N., D. Jespersen : Moderate degree symmetric quadrature rules for the triangle. J. Inst. Maths Applies 15, 19-32 (1975)
40. McNamee, J. : Error-bounds for the evaluation of integrals by the Euler-Maclaurin formula and by Gauss-type formulae. Math. Comp. 18, 368-381 (1964)
41. Meinardus, G. : Approximation von Funktionen und ihre numerische Behandlung. Berlin-Göttingen-Heidelberg-New York: Springer Verlag (1964)
42. Möller, H.M. : Kubaturformeln mit minimaler Knotenzahl. Numer. Math. 25, 185-200 (1976)
43. Morrow, C.R., T.N.L. Patterson : Construction of algebraic cubature rules using polynomial ideal theory. SIAM J. Numer. Anal. 15, 953-976 (1978)
44. Mysovskikh, I.P. : The approximation of multiple integrals by using interpolatory cubature formulae. In: Quantitative approximation (Eds.: R.A. DeVore, K. Scherer), 217-243. New York-London-Sydney-Toronto-San Francisco: Academic Press (1980)

45. Nicholson, D., P. Rabinowitz, N. Richter, D. Zeilberger:
On the error in the numerical integration of Chebyshev
polynomials. Math. Comp. 25, 79-86 (1971)
46. Phillips, G.M. : Error estimates for certain integration
rules on the triangle. In: Conference on applications of
numerical analysis (Ed.: J.L. Morris). Lecture Notes in
Math. No 228, 321-326. Berlin-New York: Springer Ver-
lag (1971)
47. Rabinowitz, P. : Rough and ready error estimates in
Gaussian integration of analytic functions. Comm. of
the ACM 12, 268-270 (1969)
48. Radon, J. : Zur mechanischen Kubatur. Monatsh. Math. 52,
286-300 (1948)
49. Rivlin, T.J. : Polynomials of best uniform approxima-
tion to certain rational functions. Numer. Math. 4,
345-349 (1962)
50. Rivlin, T.J. : The Chebyshev polynomials. New York-
London-Sydney-Toronto: John Wiley and Sons (1974)
51. Sard, A. : Linear approximation. Providence, R.I.:
Amer. Math. Soc. (1963)
52. Schmid, H.J. : On cubature formulae with a minimal
number of knots. Numer. Math. 31, 281-297 (1978)
53. Schmid, H.J. : Interpolatorische Kubaturformeln. Hekto-
graphierte Abhandlung. Erlangen (1980)
54. Stancu, D.D. : The remainder of certain linear approxi-
mation formulas in two variables. SIAM J. Numer. Anal.
1, 137-163 (1964)
55. Stroud, A.H. : Approximate calculation of multiple
integrals. Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall, Inc.
(1971)

56. Stroud, A.H., D. Secrest : Gaussian quadrature formulas. Englewood Cliffs, N. J.: Prentice-Hall, Inc. (1966)
57. Szegő, G. : Orthogonal polynomials. New York: Amer. Math. Soc. (1939)
58. Talbot, A. : On a class of Tchebysheffian approximation problems solvable algebraically. Proc. Cambridge Philos. Soc. 58, 244-267 (1962)

LEBENS LAUF

Georgios Akrivis geboren am 13.9.1950 in Chrysovitsa bei Ioannina (Griechenland) als drittes von drei Kindern der Eheleute Dimitrios und Spyridoula Akrivis

Schulbildung September 1956 - Juni 1962 Volksschule
September 1962 - Juni 1968 Gymnasium in Prevesa

Studium September 1968 - März 1973 Studium der Mathematik und Physik an der Universität Ioannina
März 1973 Diplom in Mathematik
Oktober 1977 - Oktober 1979 Studium der Mathematik an der Ludwig-Maximilians-Universität München

Wehrdienst Mai 1973 - November 1975 Wehrdienst in Griechenland

Berufstätigkeit November 1975 - September 1977 Lehrer an einem Privat-Gymnasium in Ioannina

Seit November 1979 Doktorand am Mathematischen Institut der Ludwig-Maximilians-Universität München

